

Analyse stochastischer Reaktionssysteme anhand der Extrema der stationären Fokker-Planck-Gleichung

Analyzing stochastic reaction systems using the extrema of the stationary Fokker-Planck equation

Zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

Genehmigte Dissertation von Marc Mendler aus Bensheim

Tag der Einreichung: 16.11.2020, Tag der Prüfung: 07.12.2020

1. Gutachten: Prof. Dr. Barbara Drossel

2. Gutachten: Prof. Dr. Benno Liebchen
Darmstadt



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Fachbereich Physik

Institut für Festkörperphysik

AG Drossel

Analyse stochastischer Reaktionssysteme anhand der Extrema der stationären Fokker-Planck-Gleichung
Analyzing stochastic reaction systems using the extrema of the stationary Fokker-Planck equation

Genehmigte Dissertation von Marc Mendler

1. Gutachten: Prof. Dr. Barbara Drossel
2. Gutachten: Prof. Dr. Benno Liebchen

Tag der Einreichung: 16.11.2020
Tag der Prüfung: 07.12.2020

Darmstadt

Bitte zitieren Sie dieses Dokument als:
URN: urn:nbn:de:tuda-tuprints-175199
URL: <http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/17519>

Dieses Dokument wird bereitgestellt von tuprints,
E-Publishing-Service der TU Darmstadt
<http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de>
tuprints@ulb.tu-darmstadt.de

Veröffentlicht unter CC BY-SA 4.0 International
<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

Erklärungen laut Promotionsordnung

§8 Abs. 1 lit. c PromO

Ich versichere hiermit, dass die elektronische Version meiner Dissertation mit der schriftlichen Version übereinstimmt.

§8 Abs. 1 lit. d PromO

Ich versichere hiermit, dass zu einem vorherigen Zeitpunkt noch keine Promotion versucht wurde. In diesem Fall sind nähere Angaben über Zeitpunkt, Hochschule, Dissertationsthema und Ergebnis dieses Versuchs mitzuteilen.

§9 Abs. 1 PromO

Ich versichere hiermit, dass die vorliegende Dissertation selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen verfasst wurde.

§9 Abs. 2 PromO

Die Arbeit hat bisher noch nicht zu Prüfungszwecken gedient.

Darmstadt, 16.11.2020

M. Mendler

Zusammenfassung

Die Analyse stochastischer Reaktionsnetzwerke anhand einer Master- oder Fokker-Planck-Gleichung ist in der Regel deutlich komplexer und weniger anschaulich als eine Beschreibung als deterministisches dynamisches System und meist nur numerisch möglich. Dennoch lassen sich viele interessante Phänomene, wie beispielsweise der Einfluss intrinsischen Rauschens, nur in stochastischen Modellen untersuchen. In dieser Arbeit wird daher ein Formalismus entwickelt, der – ausgehend von den Maxima und Minima der Fokker-Planck-Gleichung – eine Analyse stochastischer Reaktionsnetzwerke ermöglicht, die ebenso leicht zu handhaben ist wie die deterministische Beschreibung.

Hierzu führen wir zunächst das sogenannte Konvektionsfeld α ein, dessen Nullstellen mit den Extrema der eindimensionalen, stationären Fokker-Planck-Gleichung übereinstimmen. Mithilfe dieser Größe analysieren wir rauschinduzierte stochastische Bifurkationen im Schlögl-Modell. Hierbei zeigt sich, dass sowohl stabile Systemzustände, die durch eine Erhöhung des intrinsischen Rauschens zerstört werden, als auch rauschinduzierte Bistabilität durch das Konvektionsfeld korrekt vorhergesagt werden.

Bei der anschließenden Erweiterung des Formalismus auf mehrdimensionale Systeme ist jedoch der einfache Zusammenhang zwischen den Nullstellen von α und den Extrema der Fokker-Planck-Gleichung im Allgemeinen nicht mehr gegeben. Wir entwickeln daher eine Näherung für große Systemgrößen N , die eine Übertragung des Konvektionsfelds zumindest auf Systeme mit ausreichend großer Teilchenzahl ermöglicht. Anhand verschiedener Beispielsysteme lässt sich feststellen, dass diese Näherung für die meisten relevanten Reaktionsnetzwerke in weiten Teilen des Zustandsraum erfüllt ist.

Mithilfe des Konvektionsfelds lassen sich zudem Phasenportraits des stochastischen Systems definieren, die in weiten Teilen die gleichen Eigenschaften aufweisen wie ihre deterministischen Pendanten. Mit ihrer Hilfe analysieren wir unter anderem ein Modell nahrungssuchender Ameisen ohne Lösen der Fokker-Planck-Gleichung und unter Anwendung der gleichen mathematischen Methoden wie im deterministischen Fall. Für die hierbei erzielten Ergebnisse war ein Lösen der Fokker-Planck-Gleichung bislang unumgänglich.

Anhand eines weiteren Beispiels aus der Populationsdynamik, dem sogenannten Rosenzweig-MacArthur-Modell, können wir außerdem eine neue Art von Bifurkation identifizieren, die nur in stochastischen Systemen auftreten kann: die Nullklinen-Lücken-Bifurkation. Diese lässt sich direkt aus den stochastischen Phasenportraits ablesen.

Zuletzt erweitern wir unseren Formalismus um eine Methode zur Vorhersage stationärer Wahrscheinlichkeitsströme, die ebenfalls ohne Lösen der Fokker-Planck-Gleichung auskommt. Mit ihrer Hilfe stellen wir fest, dass an Orten, an denen unsere Näherung für kleine Systemgrößen versagt, in der Regel Dipolströme auftreten. Durch Anwendung auf verschiedene Beispielsysteme validieren wir die Vorhersagen dieser Methode. Hierbei analysieren wir unter anderem die unphysikalischen Ströme, die in der Fokker-Planck-Gleichung auftreten, wenn die zugrunde liegende Mastergleichung detailliertes Gleichgewicht aufweist.

Abstract

The analysis of stochastic reaction networks using Master or Fokker-Planck equations is usually much more complex and less intuitive than the description as a deterministic dynamical system. Furthermore it usually involves numerical calculations. Nevertheless, many interesting phenomena, such as the influence of intrinsic noise, can only be investigated in stochastic models. Therefore, the aim of this thesis is to develop a formalism that – starting with the maxima and minima of the Fokker-Planck equation – allows an analysis of stochastic reaction networks that is as easy to handle as the deterministic approach.

In order to do so, we first introduce the so-called convective field α , whose roots coincide with the extrema of the one-dimensional stationary Fokker-Planck equation. Using this quantity we analyze noise-induced stochastic bifurcations inside the Schlögl model. Hereby we see that both stable states which are destroyed by an increase of intrinsic noise as well as noise-induced bistability can be predicted correctly.

Extending the formalism to multidimensional systems we see, however, that the simple connection between the roots of α and the extrema of p_s is in general no longer valid. Therefore we develop an approximation for large system sizes N , which allows to apply the convective field at least to system with sufficiently large numbers of particles. Considering different example systems, we observe that for most reaction networks this approximation is valid in large regions of their state space.

Using the convective field it is also possible to define phase portraits of the stochastic system, which have largely the same properties as their deterministic counterparts. With their help we can, among other things, analyze a model of foraging ants without solving the Fokker-Planck equation, using the same mathematical methods as in the deterministic setting. Up until now, the results of this analysis could only be obtained by solving the Fokker-Planck equation.

Using another example from population dynamics, the Rosenzweig-McArthur model, we can also identify a new type of bifurcation that occurs only in stochastic systems: the nullcline gap bifurcation, which can be directly read from the stochastic phase portraits.

Finally, we extend our formalism by a method for the prediction of stationary probability currents. With its help we discover that usually dipole currents emerge at places where our approximation for large N fails. Applying the method to different example systems, we verify its predictions. Hereby, among other things, we analyze the non-physical probability currents that occur in the Fokker-Planck equation when the underlying Master equation is in detailed balance.

Inhaltsverzeichnis

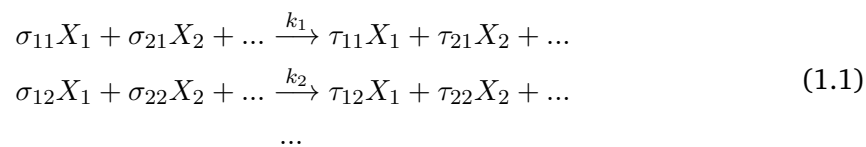
1	Einleitung	1
2	Grundlagen	5
2.1	Chemische Reaktionsnetzwerke	5
2.2	Die Mastergleichung	8
2.3	Der Gillespie-Algorithmus	10
2.4	Näherungsmethoden der Mastergleichung	11
2.4.1	Die Kramers-Moyal-Entwicklung	11
2.4.2	Die Liouville-Gleichung	11
2.4.3	Die Fokker-Planck-Gleichung	12
2.4.4	Linear-Noise-Näherung der Fokker-Planck-Gleichung	14
2.4.5	Höhere Terme der Kramers-Moyal-Entwicklung	15
2.4.6	Weitere Näherungsmethoden der Mastergleichung	15
2.5	Dynamische Systeme	16
2.6	Lineare Stabilitätsanalyse	17
2.7	Bifurkationen	18
2.7.1	Sattelnodenbifurkation	18
2.7.2	Hopfbifurkation	18
2.7.3	Stochastische Bifurkationen	19
2.8	Mittelwertsverschiebung	20
3	Charakterisierung eindimensionaler stochastischer Systeme anhand der Wahrscheinlichkeitsmaxima	23
3.1	Auf der Suche nach einfachen Größen zur Charakterisierung stochastischer Systeme	23
3.2	Das Konvektionsfeld	25
3.2.1	Lineare Stabilitätsanalyse des Konvektionsfelds	25
3.2.2	Bifurkationen des Konvektionsfelds	26
3.3	Schubhaftes Rauschen im Schlögl-Modell	26
3.3.1	Das Schlögl-Modell	26
3.3.2	Das Schlögl-Modell mit schubhaftem Rauschen	28
3.3.3	Bifurkationsanalyse anhand des Konvektionsfeldes	29
3.4	Fazit	32
4	Erweiterung auf zweidimensionale Systeme	33
4.1	Das mehrdimensionale Konvektionsfeld	34
4.2	Voraussetzungen für $\vec{j}_s \equiv 0$	35
4.3	Kopplungsterme induzieren stationäre Wahrscheinlichkeitsströme	37

4.4	Präferierte Zustände	39
4.4.1	Stabilität des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts bestimmt Art des p_s -Extremums	39
4.5	Fixpunkte mit $\vec{j} \neq 0$	40
4.6	Näherungen der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte für große N . .	41
4.7	Grenzen der \vec{j}_s -Näherung	43
4.8	Stochastische Phasenportraits	45
4.9	Nahrungssuche einer Ameisenkolonie	47
4.9.1	Das Modell	47
4.9.2	Stochastische Simulationen und Ergebnisse von Biancali et al.	48
4.9.3	Vorhersagen des Konvektionsfelds	49
4.10	Das stochastische Rosenzweig- MacArthur- Modell	51
4.10.1	Das Rosenzweig- MacArthur- Modell als Reaktionssystem	51
4.10.2	Eigenschaften des deterministischen Modells	52
4.10.3	Auswirkungen stochastischer Effekte im System mit deterministisch stabiler Spirale	53
4.10.4	Nullklinen-Lücken-Bifurkation	55
4.10.5	Auswirkungen stochastischer Effekte im System mit deterministischem Grenzzzyklus	56
4.10.6	Auswirkungen stochastischer Effekte auf die Hopf-Bifurkation	59
4.11	Fazit	59
5	Untersuchung der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte	61
5.1	Korrespondenz zwischen $\vec{\alpha}$ - und \vec{j}_s -Fixpunkten für große N	61
5.2	Der Rotationssinn von \vec{j}_s	63
5.2.1	Beispiel: Rotationssymmetrisches Modell	64
5.3	Vorhersage der Topologie von \vec{j}_s	67
5.4	Auswirkungen einzelner Reaktionsterme	67
5.4.1	\vec{j}_s für Kopplungsterme in der deterministischen Drift	67
5.4.2	Terme höherer Ordnung erzeugen Dipol-Ströme	70
5.4.3	\vec{j}_s für Kopplungsterme in der Diffusionsmatrix	72
5.4.4	Allgemeine Bedingungen für das Entstehen von Dipolströmen	73
5.5	Die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte in realistischen Reaktionssystemen	75
5.5.1	\vec{j}_s im Rosenzweig-MacArthur-Modell	75
5.5.2	Langsame transiente Zustände	76
5.5.3	\vec{j}_s bei der positiven Feedbackscheife	78
5.6	Unphysikalische stationäre Wahrscheinlichkeitsströme	81
5.7	Fazit	84
6	Diskussion	85
	Literaturverzeichnis	89

1 Einleitung

Netzwerke interagierender Spezies stellen eine wichtige Klasse von Modellen dar, die in den unterschiedlichsten Disziplinen wie beispielsweise der Chemie [1, 2], der synthetischen Biologie [3–5], der Epidemiologie [6–8], der Ökologie [9, 10] oder der Soziologie [11, 12] eingesetzt werden.

Oftmals interessiert man sich hierbei lediglich für Änderungen der Populationsgrößen der beteiligten Spezies, während die räumliche Dynamik der einzelnen Individuen nicht von Belang ist. In diesem Fall lassen sich die möglichen Interaktionen zwischen den verschiedenen Konstituenten X_i als Reaktionssystem der Form



mit $\sigma_{ir}, \tau_{ir} \in \mathbb{N}$ angeben, wobei die jeweiligen Reaktionsraten mit k_i bezeichnet werden.

Sind die betrachteten Systeme groß genug, sodass stochastische Effekte vernachlässigt werden können, lässt sich die Dynamik eines solchen Reaktionsnetzwerks als ein System gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen als sogenanntes dynamisches System beschreiben. Zur Analyse dieser Systeme existiert ein breites Spektrum an Methoden wie beispielsweise die lineare Stabilitätsanalyse und die Bifurkationstheorie. Für ein- oder zweidimensionale Systeme lassen sich zudem Phasenportraits zeichnen, aus denen sich die möglichen, qualitativ unterschiedlichen Verhaltensweisen des Systems direkt ablesen lassen [13].

Diese elegante Beschreibung wird jedoch immer ungenauer, je kleiner das betrachtete System wird. In Systemen, die aus nur wenigen Teilchen bzw. Individuen bestehen, führen die diskreten Änderungen der Teilchenzahlen, die im Rahmen einer Interaktion jeweils an zufälligen Zeitpunkten stattfinden, zum Auftreten von sogenanntem intrinsischen Rauschen. Dieses kann zu Abweichungen zwischen dem Verhalten des realen Systems und den Vorhersagen der deterministischen Beschreibung als dynamisches System führen [14–16]. Um solche Effekte adäquat zu erfassen, ist eine stochastische Beschreibung des Reaktionssystems nötig.

Eine besonders allgemeine Beschreibung solcher stochastischer Reaktionsnetzwerke stellt die sogenannte Mastergleichung dar. Hierbei handelt es sich um ein zeitkontinuierliches Markov-Modell mit diskreten Zuständen, das eine zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Systemzustände liefert [17, 18]. Wenngleich sich mithilfe des stochastischen Simulationsalgorithmus exakte Realisierungen des durch die Mastergleichung beschriebenen stochastischen Prozesses simulieren lassen [19], ist ein analytisches Lösen der Mastergleichung nur unter ganz bestimmten Voraussetzungen möglich. Daher muss abseits numerischer Untersuchungen in der Regel auf Näherungsmethoden zurückgegriffen werden.

Eine häufig genutzte Näherung der Mastergleichung stellt die Fokker-Planck-Gleichung dar. Die Fokker-Planck-Gleichung geht aus der Kramers-Moyal-Entwicklung hervor, bei der die ganzzahligen Teilchenzahlen in der Mastergleichung durch kontinuierliche Teilchenkonzentrationen ersetzt werden und anschließend für kleine Schrittgrößen entwickelt wird. Die ersten beiden Terme dieser Entwicklung, die als deterministische Drift und Diffusion bezeichnet werden, bilden dann die Fokker-Planck-Gleichung [20].

Da die Fokker-Planck-Gleichung – genau wie die Beschreibung als dynamisches System – mit kontinuierlichen Zuständen arbeitet, wird auch diese zunehmend ungenauer, wenn Systeme mit nur sehr wenigen Konstituenten betrachtet werden. Sie liefert jedoch noch immer erstaunlich genaue Vorhersagen für Systeme mit Teilchenzahlen im unteren zweistelligen Bereich, wo die Beschreibung als dynamisches System bereits zusammenbricht [21]. Aus diesem Grund stellt die Fokker-Planck-Gleichung auch den Ausgangspunkt der Untersuchungen der vorliegenden Arbeit dar.

Neben Mastergleichung, Fokker-Planck-Gleichung und ähnlichen allgemeingültigen Näherungsmethoden wie beispielsweise der Systemgrößenentwicklung [17] existiert auch eine ganze Reihe speziellerer Techniken, mit deren Hilfe sich die unterschiedlichsten Eigenschaften eines stochastischen Systems analysieren lassen. Zu diesen zählen unter Anderem effektive mesoskopische Ratengleichungen [22], wahrscheinlichste Trajektorien [23], stochastische Stabilitätsanalysen [24], mittlere Umschaltzeiten in multistabilen Systemen [20], stochastisch resonante Zyklen [16, 25] oder abschnittsweise markovsche Prozesse [26, 27]. Auch eine Untersuchung stochastischer Bifurkationen lässt sich anhand der Theorie zufälliger dynamischer Systeme bewerkstelligen [28, 29].

All diese Methoden haben vor allem gemeinsam, dass sie mathematisch in der Regel noch immer deutlich aufwendiger sind als die Beschreibung als deterministisches dynamisches System. Zudem beschränken sich viele dieser Ansätze auf einige wenige Aspekte des stochastischen Systems, sodass es oftmals schwierig ist, einen Gesamtüberblick über das qualitative Langzeitverhalten des Systems zu erhalten wie ihn beispielsweise Phasenportraits in deterministischen Systemen ermöglichen.

Aufgrund dieser mathematischen Komplexität ist es in der Regel mit großem Aufwand verbunden, von einer deterministischen Beschreibung – beispielsweise eines biologischen Systems – zu einer stochastischen Beschreibung desselben überzugehen. Diese Problematik ist sicherlich der Hauptgrund dafür, dass sich deterministische Modelle einer solchen Beliebtheit erfreuen, während stochastische Modellierungen in der Regel eher selten angewandt werden, obwohl diese oftmals dazu in der Lage wären, bessere Ergebnisse zu liefern, insbesondere wenn intrinsisches Rauschen eine Rolle spielt [10, 30–33].

Es wäre daher äußerst erstrebenswert einen Formalismus zu entwickeln, mit dessen Hilfe sich die wichtigsten Eigenschaften stochastischer Systeme auf ähnlich einfache Weise berechnen ließen wie in der deterministischen Beschreibung als dynamisches System. Neben dieser mathematischen Einfachheit sollte ein solcher Formalismus insbesondere die deterministische Beschreibung als Grenzfall enthalten, sodass sich für Systeme mit sehr vielen Konstituenten wieder die gleiche Dynamik wie im deterministischen Modell ergibt.

Mit dem Konvektionsfeld und den stochastischen Phasenportraits wird in der vorliegenden Arbeit ein solcher Formalismus eingeführt und anhand verschiedener Anwendungsbeispiele verifiziert. Hierbei gehen wir von der Beobachtung aus, dass sich Maxima und Minima der stationären eindimensionalen Fokker-Planck-Gleichung analytisch berechnen lassen.

Während die meisten Näherungsverfahren der Fokker-Planck-Gleichung vom Mittelwert der Verteilung ausgehen, sollen hier stattdessen die Extrema der Verteilung im Fokus stehen. Wie wir im Laufe dieser Arbeit noch sehen werden, liegen diese Maxima und Minima im Grenzfall großer Teilchenzahlen genau am Ort der stabilen bzw. instabilen Fixpunkte der dazugehörigen Näherung als dynamisches System, sodass eine Korrespondenz zur deterministischen Beschreibung automatisch gegeben ist. Zudem erlaubt die analytische Beschreibung dieser Extrema eine äußerst elegante Analyse sogenannter stochastischer p-Bifurkationen, die die einzigen Bifurkationen darstellen, die in stochastischen Reaktionsnetzwerken auftreten können [34].

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden die wichtigsten Grundlagen zu stochastischen Reaktionsnetzwerken, der Modellierung mit Mastergleichung, Fokker-Planck-Gleichung und als dynamisches System sowie zu deterministischen und stochastischen Bifurkationen rekapituliert. Außerdem wird mit der Mittelwertsverschiebung ein einfaches Beispiel einer stochastischen Korrektur eines deterministischen Modells erläutert.

In Kapitel 3 wird das Konvektionsfeld α für eindimensionale stochastische Systeme eingeführt, mit dessen Hilfe die Extrema der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s aus der Fokker-Planck-Gleichung analytisch berechnet werden können. Am Beispiel des Schlögl-Modells wird die Anwendung von α zur Analyse stochastischer p-Bifurkationen gezeigt. Dieser Formalismus wird in Kapitel 4 auf zweidimensionale Systeme erweitert. Hierbei zeigt sich allerdings, dass α für die allermeisten zwei- oder höherdimensionalen Systeme nur noch näherungsweise für ausreichend große Systemgrößen N zur Bestimmung der Extrema von p_s herangezogen werden kann. Es folgt eine Analyse, wann diese Näherung noch gerechtfertigt ist sowie einige Beispiele. Hierbei lässt sich feststellen, dass das Konvektionsfeld auch für zweidimensionale Systeme noch erstaunlich gute Ergebnisse liefert. Am Beispiel des stochastischen Rosenzweig-MacArthur-Modells können wir eine spezielle Art von stochastischer Bifurkation finden, die kein Analogon in deterministischen Systemen besitzt: die Nullklinen-Lücken-Bifurkation. Trotz dieser Erfolge bleibt die Frage offen wie mit Systemen zu verfahren ist, bei denen die näherungsweise Übereinstimmung zwischen den Fixpunkten des Konvektionsfelds und den p_s -Extrema zusammenbricht.

Diese Frage hängt eng mit der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s zusammen, die in Kapitel 5 genauer analysiert wird. Hierzu wird dort zunächst eine Vorhersagemethode entwickelt, um diese Ströme anhand des Konvektionsfelds abzuschätzen, ohne die Fokker-Planck-Gleichung zu lösen. Diese Methode wird dann auf eine Vielzahl einfacher Beispielsysteme angewandt, um den Einfluss unterschiedlicher Kopplungsterme auf das Langzeitverhalten des stochastischen Systems zu untersuchen. Hierbei zeigt sich, dass in Systemen, in denen die Näherung mithilfe des Konvektionsfelds besonders schlecht ist, so dass einem α -Fixpunkt kein p_s -Extremum mehr zugeordnet werden kann, Dipolströme in \vec{j}_s entstehen. Anhand einfacher Überlegungen lassen sich mithilfe des Konvektionsfelds spezielle Systeme identifizieren, bei denen diese Dipolströme unabhängig von der Wahl der Parameter auftreten. Eine Anwendung der Vorhersagemethode für \vec{j}_s auf verschiedene, komplexere Beispielsysteme, welche nun auch Multimodalität und Grenzzyklen beinhalten, schließt diesen Abschnitt ab.

Eine Zusammenfassung aller Ergebnisse sowie ein abschließender Vergleich mit ähnlichen, bereits bekannten Methoden, folgt schließlich in Kapitel 6.

2 Grundlagen

2.1 Chemische Reaktionsnetzwerke

Netzwerke interagierender Spezies lassen sich oftmals in Form eines Reaktionsnetzwerkes angeben. Dies bedeutet, dass alle möglichen Interaktionen zwischen den verschiedenen Netzwerkspezies als ein System chemischer Reaktionsgleichungen der Form

$$\sum_{i=1}^M \sigma_{ir} X_i \xrightarrow{k_r} \sum_{i=1}^M \tau_{ir} X_i \quad (2.1)$$

geschrieben werden können. Hierbei durchlaufen die Indizes i jeweils die einzelnen Spezies X_i , der Index r die möglichen Reaktionen, deren Reaktionsraten mit k_r bezeichnet sind. Weiterhin geben die sogenannten stöchiometrischen Konstanten σ_{ir} und τ_{ir} an, wie viele Individuen einer Spezies X_i als Reaktant vorliegen müssen, damit die Reaktion r stattfinden kann, bzw. welche Mengen der jeweiligen Reaktionsprodukte entstehen. Im Folgenden bezeichnen wir zudem die Anzahl an Individuen der Spezies X_i mit n_i . Der Zustand des Netzwerks zum Zeitpunkt t ist dann vollständig bestimmt durch die Angabe des Zustandsvektors $\vec{n}(t)$, der die Teilchenzahlen aller Spezies festlegt.

Beispiel:

Ein mögliches chemisches Reaktionsnetzwerk lautet:



Der Zustand dieses Reaktionssystems zum Zeitpunkt t ist durch Angabe des Zustandsvektors

$\vec{n}(t) = \begin{pmatrix} n_x(t) \\ n_y(t) \end{pmatrix}$ vollständig bestimmt.

Anstelle der Teilchenzahlen n_i der verschiedenen Spezies, ist es oftmals sinnvoll die Stoffkonzentrationen $\phi_i := n_i/N$ zu betrachten. Hierbei bezeichnet N die sogenannte Systemgröße. Diese ist in abgeschlossenen Systemen identisch mit der Gesamtteilchenzahl und kann in offenen Systemen als ein Maß für das verfügbare Reaktionsvolumen interpretiert werden. Der Einfachheit halber werden wir im Laufe dieser Arbeit auch die Abkürzungen $x = \phi_x, y = \phi_y$ usw. für die Teilchenkonzentrationen verwenden.

Um den Umgang mit Reaktionsnetzwerken der Form (2.1) zu vereinfachen, ist es sinnvoll, einige weitere Größen einzuführen [35]: Die Einträge der *stöchiometrischen Matrix*

$$S_{ir} = \tau_{ir} - \sigma_{ir} \quad (2.3)$$

geben an, wie sich die Teilchenzahlen n_i der Spezies X_i beim Durchlaufen der Reaktion r verändern.

Der *Propensitätsvektor*

$$\begin{aligned} \nu_r(\vec{n}) &= k_r \prod_{i=1}^M N^{-\sigma_{ir}} \sigma_{ir}! \frac{n_i!}{(n_i - \sigma_{ir})!} \\ &\approx k_r \prod_{i=1}^M \sigma_{ir}! \left(\frac{n_i}{N}\right)^{\sigma_{ir}} \text{ für } n_i \gg \sigma_{ir} . \\ &= \tilde{k}_r \prod_{i=1}^M \phi_i^{\sigma_{ir}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

beschreibt die tatsächliche Rate eines Reaktionskanals r bei gegebenen Teilchenzahlen n_i . Der Faktor $\sigma_{ir}!$ trägt nur bei Reaktionen bei, bei denen eine Spezies mit sich selbst interagiert und kann in die Definition der Reaktionsraten \tilde{k}_r absorbiert werden. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden von nun an immer direkt die umskalierten Reaktionsraten \tilde{k}_r angegeben.

Im Gegensatz zu den Reaktionsraten k_r beinhalten die Propensitäten auch die Wahrscheinlichkeiten dafür, dass sich die jeweiligen Reaktionspartner innerhalb des gegebenen Reaktionsvolumens begegnen, wie wir anhand der folgenden Beispiele illustrieren wollen:

Beispiel:

Die Reaktion



besitzt die Propensität $\nu_2(\vec{n}) = k_2 \cdot \frac{n_x \cdot n_y}{N^2}$, da die Wahrscheinlichkeit, aus N Molekülen ein Molekül der Sorte X und eines der Sorte Y zu ziehen genau $\frac{n_x \cdot n_y}{N^2}$ beträgt.

Die Reaktion



besitzt die Propensität $\nu_3(\vec{n}) = k_3 \cdot \frac{n_y \cdot (n_y - 1)}{N^2}$, da die Wahrscheinlichkeit, aus N Molekülen zwei Moleküle der Sorte Y zu ziehen genau $2 \frac{n_y \cdot (n_y - 1)}{N^2}$ beträgt, wobei wir den Vorfaktor 2 in die Definition der Reaktionsrate k_3 absorbieren können.

Das Reaktionssystem (2.2) besitzt somit die stöchiometrische Matrix

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

und den Propensitätsvektor

$$\vec{\nu} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \frac{n_x n_y}{N^2} \\ k_3 \frac{n_y (n_y - 1)}{N^2} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \phi_x \phi_y \\ k_3 \phi_y^2 \end{pmatrix} . \quad (2.8)$$

Bei den in (2.4) beschriebenen Propensitäten mit $k_r \in \mathbb{R}$, spricht man auch vom *Massenwirkungsgesetz*. Für die meisten chemischen Reaktionen ist dieses in sehr guter Näherung erfüllt. Für biochemische Prozesse oder Interaktionen in Räuber-Beute-Netzwerken ist es jedoch üblich, auch andere Arten von Reaktionsraten zuzulassen wie beispielsweise die Michaelis-Menton-Kinetik oder Holling-Typ funktionelle Antworten [36, 37]. Solche komplexeren Reaktionsraten können in unserem Formalismus durch konzentrationsabhängige Werte der k_r implementiert werden, wovon wir in späteren Kapiteln auch an mehreren Stellen Gebrauch machen werden.

Mithilfe von stöchiometrischer Matrix und Propensitätsvektor lässt sich nun auf verschiedene Weisen die zeitliche Entwicklung eines Reaktionssystems formulieren. Diese unterschiedlichen Varianten sollen in den folgenden Abschnitten vorgestellt werden.

2.2 Die Mastergleichung

Die *Mastergleichung* ist eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung, die die Entwicklung einer diskreten Menge von Zuständen in kontinuierlicher Zeit beschreibt. Hierbei wird jedem Zustand n eine Wahrscheinlichkeit $P(n)$ zugeordnet. Die Mastergleichung lautet dann [20]:

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = \sum_m \mu(n|m)P(m,t) - \sum_m \mu(m|n)P(n,t). \quad (2.9)$$

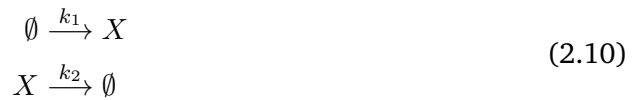
mit den Übergangsraten $\mu(n|m)$ von Zustand m zu Zustand n .

Die Mastergleichung bilanziert also, wie viel Wahrscheinlichkeit pro Zeit von benachbarten Zuständen m in den betrachteten Zustand n fließt (erster Term) und wie viel Wahrscheinlichkeit vom betrachteten Zustand n in diese Nachbarzustände abfließt (zweiter Term).

Betrachtet man die Mastergleichung im Kontext chemischer Reaktionsnetzwerke, so stellt nun jeder mögliche Zustandsvektor \vec{n} des Reaktionssystems einen möglichen Zustand der Mastergleichung dar. Weiterhin sind die Übergangsraten zwischen diesen Zuständen durch die vorhandenen Reaktionen vorgegeben. Es ist wichtig sich klar zu machen, dass ein solches Reaktionssystem im Allgemeinen unendlich viele Zustände besitzt. Zudem stellt jede einzelne vorhandene Reaktion in der Regel eine unendliche Anzahl an Übergängen zwischen diesen Zuständen dar.

Beispiel:

Das Reaktionssystem



Besitzt unendlich viele Zustände mit $n_x \in \{0,1,2,\dots\}$. Weiterhin existieren unendlich viele Übergänge zwischen diesen Zuständen mit $\mu(n|m) = \delta_{n-1,m} \cdot k_1 + \delta_{n+1,m} \cdot \frac{k_2 \cdot m}{N}$.

Die zugehörige Mastergleichung lautet

$$\begin{aligned} \frac{dP(n_x,t)}{dt} &= k_1 \cdot P(n_x - 1, t) + \frac{k_2(n_x + 1)}{N} P(n_x + 1, t) \\ &\quad - k_1 \cdot P(n_x, t) - \frac{k_2 n_x}{N} P(n_x, t), \end{aligned} \quad (2.11)$$

wobei $P(x < 0) = 0$ ist.

Für solche Systeme ist es zweckmäßig, die Summe in der Mastergleichung über alle Zustände in eine Summe über alle Reaktionen umzuwandeln:

$$\frac{dP(\vec{n}, t)}{dt} = N \sum_r \left[\nu_r(\vec{n} - \vec{S}_r) P(\vec{n} - \vec{S}_r, t) - \nu_r(\vec{n}) P(\vec{n}, t) \right], \quad (2.12)$$

wobei $\nu_r(\vec{n})$ nun wieder den Propensitätsvektor (2.4), \vec{S}_r einen Spaltenvektor der Stöchiometrischen Matrix (2.3) bezeichnet und r alle möglichen Reaktionen durchläuft.

Hierbei hängen die Übergangsraten in (2.9) mit den Propensitäten über die Beziehung

$$\mu(\vec{n}|\vec{m}) = N \sum_{r: \vec{n}-\vec{m}=\vec{S}_r} \nu_r(\vec{n} - \vec{S}_r), \quad (2.13)$$

zusammen, wobei hier über alle Reaktionen summiert wird, die vom Zustand \vec{m} zum Zustand \vec{n} führen.

Mithilfe des Schritt-Operators \mathbb{E}_i , der über

$$\mathbb{E}_i^\alpha f(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_k) = f(n_1, n_2, \dots, n_i + \alpha, \dots, n_k) \quad (2.14)$$

für eine beliebige Funktion f und $\alpha \in \mathbb{Z}$ definiert ist, lässt sich (2.12) auch als

$$\frac{dP(\vec{n}, t)}{dt} = N \sum_r \left(\prod_{i=1}^M \mathbb{E}_i^{-S_{ir}} - 1 \right) \nu_r(\vec{n}) P(\vec{n}, t) \quad (2.15)$$

schreiben. Diese Gleichung wird auch als *chemische Mastergleichung* bezeichnet [21, 38].

Gillespie erkannte bereits 1992, dass die Mastergleichung eine exakte Beschreibung (gasförmiger) chemischer Reaktionssysteme liefert, solange diese gut durchmischt sind und sich im thermischen Gleichgewicht befinden [38]. Dies ist vor allem deshalb bemerkenswert, da es sich um eine phänomenologische Gleichung handelt, die etliche mikroskopische Details, wie beispielsweise Aufenthaltsort und Geschwindigkeit der einzelnen Teilchen, außer Acht lässt. Diese Reduktion der Dynamik des Systems auf die wesentlichen Größen macht die Mastergleichung besonders elegant und spart gegenüber Molekulardynamiksimulationen, bei denen alle wesentlichen mikroskopischen Teilcheneigenschaften explizit simuliert werden müssen, wesentlich an Rechenzeit ein.

Nichtsdestotrotz ist es oftmals nicht möglich die Mastergleichung analytisch zu lösen. Während dies für Systeme mit endlicher Zustandszahl problemlos zu bewerkstelligen ist, lässt sich für Systeme mit einer unendlichen Anzahl von Zuständen bis auf wenige Ausnahmen keine geschlossene Lösung angeben. Da die Mastergleichungen, die wir hier betrachten, fast ausschließlich in diese Kategorie fallen, sind wir in der Regel auf Computersimulationen und Näherungsmethoden angewiesen.

2.3 Der Gillespie-Algorithmus

Eine Möglichkeit zur Lösung der Mastergleichung stellt der sogenannte Gillespie-Algorithmus dar. Hierbei wird nicht, wie bei vielen Computerprogrammen üblich, die Zeit in einzelne Frames eingeteilt und in jedem Frame ausgewürfelt, ob eine Reaktion stattfindet oder nicht. Stattdessen wird zunächst eine Zufallszahl gezogen, die angibt, wann die nächste Reaktion stattfindet und um welche Reaktion es sich handelt.¹ Anschließend wird die Zeit um diesen Wert inkrementiert, die Stoffmengen entsprechend der erwürfelten Reaktion angepasst und der Algorithmus beginnt von Vorne. Neben der Rechenzeit, die gegenüber einem „naiven“ Ansatz mit diskretisierter Zeit eingespart wird, kann so auch die Genauigkeit der Simulation gesteigert werden. In der Tat lässt sich zeigen, dass dieser Algorithmus dazu in der Lage ist die exakte Realisierung einer Trajektorie der Mastergleichung zu erzeugen [19]. Nichtsdestotrotz müssen in der Regel im Anschluss mehrere solcher Trajektorien gemittelt werden, um ein mit der Lösung der ursprünglichen Mastergleichung vergleichbares Histogramm zu erhalten.

Sofern nicht anders angegeben, wurden alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Gillespie-Simulationen mithilfe des Programms *Dizzy Gillespie* [39] durchgeführt und mit Python oder *Wolfram Mathematica* ausgewertet.

¹Details hierzu siehe [19]

2.4 Näherungsmethoden der Mastergleichung

Neben solchen Simulationen bieten auch verschiedenste Näherungsmethoden einen einfacheren Zugang zu Systemen, die durch die Mastergleichung beschrieben werden. Hier dominieren vor allem zwei unterschiedliche Ansätze: Zum einen die sog. Kramers-Moyal-Entwicklung, bei der die Schrittweiten in der Mastergleichung immer kleiner und schließlich kontinuierlich gemacht werden sowie die van Kampen- oder Systemgrößenentwicklung, bei der in Vielfachen der Systemgröße N entwickelt wird [17]. Wir werden uns im Folgenden vor allem auf die Kramers-Moyal-Entwicklung konzentrieren, da aus dieser die Fokker-Planck-Gleichung mit nichtlinearen Koeffizienten hervorgeht, die eine wichtige Grundlage der vorliegenden Arbeit darstellt.

2.4.1 Die Kramers-Moyal-Entwicklung

Die Kramers-Moyal-Entwicklung entspricht einer Taylorreihe der Mastergleichung (2.9) für kleine Schrittgrößen zwischen den Zuständen n, m . Angelehnt an die in der Literatur übliche Notation, denken wir uns einen eindimensionalen Random Walk mit Ort x als Zustandsvariable und entwickeln für kleine Schrittweiten Δx . Weiterhin rechnen wir mit $N = 1$. Vollzieht man nun den Übergang zu kontinuierlichen Schrittweiten, gehen die Summen über benachbarte Zustände in Integrale über Δx über. Die Taylorreihe dieser Mastergleichung lautet dann [40]:

$$\frac{dp(x, t)}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [a_n(x)p(x, t)] \quad (2.16)$$

mit

$$a_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta x)^n \mu(x, x - \Delta x) d(\Delta x) . \quad (2.17)$$

2.4.2 Die Liouville-Gleichung

Bricht man diese Entwicklung nach dem ersten Glied ab, ergibt sich die sog. *Liouville-Gleichung*, die allgemein lautet [20]:

$$\frac{\partial p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [f_i(\vec{x}) p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')] , \quad (2.18)$$

mit der mehrdimensionalen Erweiterung des Koeffizienten $a_1(x)$, der sog. *deterministischen Drift* \vec{f} , die sich im Kontext chemischer Reaktionsnetzwerke via

$$\vec{f} = \mathbf{S} \cdot \vec{\nu} \quad (2.19)$$

auf einfache Weise aus stöchiometrischer Matrix und Propensitätsvektor berechnen lässt.

Die Liouville-Gleichung beschreibt die zeitliche Erhaltung des Phasenraumvolumens. Ihre Lösung entspricht einer Deltafunktion

$$p(\vec{x}, t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}(t)) , \quad (2.20)$$

deren zeitlicher Verlauf der Differentialgleichung

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \vec{f}(\bar{x}) \quad (2.21)$$

gehört. Diese Differentialgleichung beschreibt den zeitlichen Verlauf des Mittelwerts \bar{x} von \vec{x} aus der Mastergleichung in führender Ordnung. Da hierbei keine weiteren Aussagen mehr über die Verteilung $p(\vec{x})$ getroffen werden, handelt es sich um eine deterministische Gleichung, was auch den Namen deterministische Drift erklärt.

Für viele Anwendungsfälle ist diese führende Näherung vollkommen ausreichend, da sie bereits eine ganze Menge interessanter Phänomene beinhaltet. Wir werden ihr daher auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit an etlichen Stellen begegnen. Gleichungen der Form (2.21) bezeichnet man als *dynamisches System*. Ihre Eigenschaften werden in Abschnitt 2.5 noch näher erläutert.

2.4.3 Die Fokker-Planck-Gleichung

Bricht man die Entwicklung (2.16) erst nach dem zweiten Term ab, ergibt sich die sog. *Fokker-Planck-Gleichung*:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [a_1(x)p(x,t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [a_2(x)p(x,t)] , \quad (2.22)$$

bzw. für mehr als eine Dimension und allgemeine Systemgrößen N :

$$\frac{\partial p(\vec{x},t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [f_i(\vec{x})p(\vec{x},t)] + \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [D_{ij}(\vec{x})p(\vec{x},t)] , \quad (2.23)$$

mit der *Diffusionsmatrix*

$$\mathbf{D} = \mathbf{S} \cdot \text{diag}(\vec{\nu}(\vec{x})) \cdot \mathbf{S}^T, \quad (2.24)$$

die der mehrdimensionalen Verallgemeinerung des Koeffizienten $a_2(x)$ entspricht und sich ebenfalls auf einfache Weise aus stöchiometrischer Matrix und Propensitätsvektor berechnen lässt.

Beispiel:

Drift und Diffusion des Systems (2.2) mit stöchiometrischer Matrix (2.7) und Propensitätsvektor (2.8) lauten

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} k_1 - k_2xy + k_3y^2 \\ k_2xy - 2k_3y^2 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

sowie

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} k_1 + k_2xy + k_3y^2 & -k_2xy - 2k_3y^2 \\ -k_2xy - 2k_3y^2 & k_2xy + 4k_3y^2 \end{pmatrix} , \quad (2.26)$$

wobei die Abkürzungen $x = \phi_x$ und $y = \phi_y$ genutzt wurden.

Die Fokker-Planck-Gleichung dieses Systems lautet somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x,y,t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x} [(k_1 - k_2xy + k_3y^2) \cdot p(x,y,t)] - \frac{\partial}{\partial y} [(k_2xy - 2k_3y^2) \cdot p(x,y,t)] \\ & + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [(k_1 + k_2xy + 2k_3y^2) \cdot p(x,y,t)] + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [(k_2xy + 4k_3y^2) \cdot p(x,y,t)] \\ & + \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} [(-k_2xy - 2k_3y^2) \cdot p(x,y,t)] . \end{aligned} \quad (2.27)$$

Während der Driftvektor $\vec{f}(\vec{x})$ eine gerichtete Bewegung des Mittelwerts der Wahrscheinlichkeitsdichte beschreibt, steht die Diffusion für ein ungerichtetes Auseinanderfließen der Verteilung.

Die Fokker-Planck-Gleichung ist kontinuierlich in der Zeit sowie den Zuständen des Systems. Während die Mastergleichung die zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in den einzelnen Zuständen des Systems angibt, beschreibt die Fokker-Planck-Gleichung die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte im kontinuierlichen System. Obwohl durch den Kontinuumslimit in der Kramers-Moyal-Entwicklung Information über das System verloren geht, ist die Fokker-Planck-Gleichung immer noch in der Lage eine Vielzahl von stochastischen Effekten korrekt zu beschreiben, insbesondere auch dann, wenn diese durch *intrinsisches Rauschen*, also aufgrund der diskreten Teilchenzahlen in der zugrunde liegenden Mastergleichung, verursacht werden [14,25,41,42]. Dies macht die Fokker-Planck-Gleichung zu einem mächtigen Werkzeug, auf das wir den Großteil der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methoden aufbauen werden.

Führt man die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j} = \vec{f}(\vec{x}) \cdot p(\vec{x}, t) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} [D_{ij}(\vec{x}) p(\vec{x}, t)] \vec{e}_i \quad (2.28)$$

ein, so lässt sich die Fokker-Planck-Gleichung auch als Kontinuitätsgleichung der Form

$$\frac{\partial p(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) \quad (2.29)$$

schreiben.

In dieser Formulierung wird klar, dass sich die Stationaritätsbedingung $\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = 0$ auch als

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.30)$$

schreiben lässt. Während diese Bedingung im eindimensionalen Fall aufgrund der Randbedingungen $\vec{j}|_{\text{Rand}} = 0$ mit $j \equiv 0$ identisch ist, können für zwei oder mehr Dimensionen im Allgemeinen auch Kreisströme als stationäre Lösung auftreten. Im Rahmen dieser Arbeit werden wir diese noch genauer analysieren und hierbei auch eine Methode zur Vorhersage ihrer Topologie entwickeln.

Beschränken wir uns jedoch zunächst auf eine Dimension. In diesem Fall lässt sich eine explizite, analytische Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung angeben:

$$\begin{aligned} j_s(x) &= 0 \\ \Rightarrow 0 &= f \cdot p_s(x) - \frac{1}{2N} \frac{\partial}{\partial x} (D(x)p_s(x)) \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow p'_s(x) = \frac{2N}{D(x)} \underbrace{\left(f - \frac{D'(x)}{2N} \right)}_{\alpha(x)} p_s(x) . \quad (2.32)$$

Hierbei haben wir – der Notation in [43] folgend – die Größe $\alpha(x)$ eingeführt, die wir ab sofort als *Konvektionsfeld* bezeichnen werden. Wie man Gleichung (2.32) leicht ansieht, verschwindet $p'_s(x)$ für $\alpha = 0$. Die Nullstellen des Konvektionsfeldes geben also die lokalen Maxima und Minima der eindimensionalen Fokker-Planck-Gleichung an.

Einsetzen der Randbedingungen $j(0) = j(\infty) = 0$ liefert schließlich die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} p_s(x) &= \frac{A}{D(x)} \exp \left(2N \int_0^x \frac{f(\tilde{x})}{D(\tilde{x})} d\tilde{x} \right) \\ &= A \exp \left(2N \int_0^x \frac{\alpha(\tilde{x})}{D(\tilde{x})} d\tilde{x} \right) . \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.4.4 Linear-Noise-Näherung der Fokker-Planck-Gleichung

Obwohl sich für die mehrdimensionale Fokker-Planck-Gleichung im Allgemeinen keine analytische Lösung mehr angeben lässt, lässt sich durch Linearisieren eine vereinfachte Variante konstruieren, die erneut unabhängig der jeweiligen Drift und des Diffusionsterms analytisch lösbar ist.

Hierzu starten wir mit der Fokker-Planck-Gleichung (2.23), die wir um einen Fixpunkt \vec{x}_0 der deterministischen Drift linearisieren wollen. Hierzu führen wir die Größe $\vec{\epsilon} = \vec{x} - \vec{x}_0$ ein, die den Abstand zu diesem Fixpunkt angibt. Passend hierzu definieren wir die Wahrscheinlichkeitsdichte $\Pi(\vec{\epsilon}, t) = p(\vec{x}_0 + \vec{\epsilon}, t) = p(\vec{x}, t)$ und erhalten zunächst

$$\frac{\partial \Pi(\vec{\epsilon}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} [f_i(\vec{x}_0 + \vec{\epsilon}) \Pi(\vec{\epsilon}, t)] + \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \epsilon_i \partial \epsilon_j} [D_{ij}(\vec{x}_0 + \vec{\epsilon}) \Pi(\vec{\epsilon}, t)] . \quad (2.34)$$

Wir entwickeln diese Gleichung nun für kleine ϵ und behalten jeweils nur den führenden Term:

$$\frac{\partial \Pi(\vec{\epsilon}, t)}{\partial t} = - \sum_{ij} J_{\vec{f}}^{ij}(\vec{x}_0) \frac{\partial (\epsilon_j \Pi)}{\partial \epsilon_i} + \frac{1}{2N} \sum_{ij} D_{ij}(\vec{x}_0) \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \epsilon_i \partial \epsilon_j} , \quad (2.35)$$

mit der Jacobimatrix $J_{\vec{f}}^{ij}(\vec{x}) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$.

Diese Gleichung wird als *Linear-Noise-Näherung* bezeichnet [17]. Im Gegensatz zur allgemeinen Fokker-Planck-Gleichung mit nichtlinearen Koeffizienten lässt sich (2.35) stets analytisch lösen, wodurch sich die folgende zeitabhängige Gaußkurve für das Rauschen im System ergibt [44]:

$$\Pi(\vec{\epsilon}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d \det(\Sigma(t))}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} (\vec{\epsilon} - \vec{\mu}(t))^T \cdot \Sigma^{-1}(t) \cdot (\vec{\epsilon} - \vec{\mu}(t)) \right]. \quad (2.36)$$

Hierbei sind der zeitabhängige Mittelwert $\vec{\mu}(t)$ und die Kovarianzmatrix $\Sigma(t)$ durch folgende Differentialgleichungen gegeben:

$$\frac{d}{dt} \vec{\mu} = J_{\vec{f}} \cdot \vec{\mu} \quad (2.37)$$

$$\frac{d}{dt} \Sigma = J_{\vec{f}} \cdot \Sigma + \Sigma \cdot J_{\vec{f}}^T + D. \quad (2.38)$$

Aus (2.37) ergibt sich im stationären Fall $\vec{\mu} = 0$, aus (2.38) wird ein einfaches Gleichungssystem für die Kovarianzmatrix Σ .

Die stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung lässt sich somit in der Nähe eines \vec{f} -Fixpunkts stets als Gaußverteilung nähern. Die Kovarianzmatrix dieser Gaußverteilung lässt sich über (2.38) auf einfache Weise aus Drift und Diffusionsmatrix berechnen.

2.4.5 Höhere Terme der Kramers-Moyal-Entwicklung

Betrachtet man die Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung aus der Kramers-Moyal-Entwicklung, so liegt der Gedanke nahe, die Güte der Näherung der Mastergleichung durch Hinzunahme weiterer, höherer Terme noch zu verbessern. Die hieraus resultierenden Gleichungen liefern allerdings im Allgemeinen unphysikalische Ergebnisse in Form von negativen oder nicht normierten Wahrscheinlichkeitsdichten. Tatsächlich lässt sich zeigen, dass die Kramers-Moyal-Entwicklung nur für $n \leq 2$ oder $n = \infty$ auf eine gültige Wahrscheinlichkeitsdichte führt (Pawula Theorem) [45, 46].

2.4.6 Weitere Näherungsmethoden der Mastergleichung

Alternativ zur Kramers-Moyal-Entwicklung existieren noch weitere Näherungsmethoden der Master-Gleichung. Eine der bekanntesten ist die Systemgrößenentwicklung [17], die in führender Ordnung wieder auf die deterministische Gleichung (2.21), in der nächst höheren Ordnung direkt auf die Linear-Noise-Näherung (2.35) führt. Im Gegensatz zur Kramers-Moyal-Entwicklung lassen sich durch Hinzunahme höherer Terme in der Systemgrößenentwicklung weitere Näherungen konstruieren [17, 22], die jedoch der Fokker-Planck-Gleichung mit nichtlinearen Koeffizienten (2.23) in der Regel unterlegen sind [21].

Eine weitere häufig genutzte Alternative zur Näherung der Mastergleichung stellen sogenannte *Moment-Closure-Methoden* dar, bei denen höhere Momente der Verteilung ab einem gewissen Cutoff auf null gesetzt werden, sodass sich ein geschlossenes Gleichungssystem zur Berechnung der übrigen Momente ergibt [47].

2.5 Dynamische Systeme

Die Grundlagen zu dynamischen Systemen, linearer Stabilitätsanalyse und Bifurkationstheorie wurden zum Großteil aus [13] übernommen.

Ein Gleichungssystem der Form

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, \dots, x_n) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= f_n(x_1, \dots, x_n)\end{aligned}\tag{2.39}$$

bezeichnet man als dynamisches System. Hierbei ist wichtig zu beachten, dass die Funktionen $f_1(x_1, \dots, x_n)$ keine explizite Zeitabhängigkeit aufweisen dürfen.

Dynamische Systeme stellen die einfachste Näherung der Mastergleichung bzw. Fokker-Planck-Gleichung dar. Sie beschreiben die Änderung der Mittelwerte der betrachteten Größen auf deterministische Weise.

Das Langzeitverhalten eines dynamischen Systems wird durch seine Attraktoren bestimmt. Diese stellen Zustandsmengen im Phasenraum dar, auf die sich das System im Laufe der Zeit zubewegt und die anschließend nicht mehr verlassen werden können. Während eindimensionale Systeme hier ausschließlich Fixpunkte aufweisen, können zweidimensionale Systeme daneben auch Grenzzyklen beinhalten. Ab drei Dimensionen sind schließlich auch chaotische Attraktoren möglich, auf die im Rahmen dieser Arbeit allerdings nicht weiter eingegangen werden soll, da wir hier ausschließlich ein- und zweidimensionale bzw. effektiv zweidimensionale Systeme betrachten werden.

Die Fixpunkte \vec{x}_0 eines dynamischen Systems ergeben sich über die Gleichung

$$\vec{f}(\vec{x}_0) = 0 .\tag{2.40}$$

Da die Lage eines Fixpunktes allein nur begrenzt Aussagen über das Langzeitverhalten des Systems zulässt, ist es im Allgemeinen nötig, zumindest auch dessen Stabilität zu bestimmen. So stellen stabile Fixpunkte Attraktoren des Systems dar, auf die die Trajektorien, d.h. die Bahnkurven $\vec{x}(t)$, die sich als Lösung von (2.39) ergeben, zulaufen. Instabile Fixpunkte hingegen stoßen die Trajektorien des Systems ab, sodass nur ein System, das exakt auf einem instabilen Fixpunkt initialisiert wurde, dort verweilen kann. Die weitverbreitetste Methode zur Bestimmung der Stabilität eines Fixpunkts stellt die *lineare Stabilitätsanalyse* dar.

2.6 Lineare Stabilitätsanalyse

Bei der linearen Stabilitätsanalyse wird ein gegebenes dynamisches System in der Umgebung eines Fixpunkts \vec{x}_0 von $\vec{f}(\vec{x})$ linearisiert, d.h. aus (2.39) wird

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = J_{\vec{f}}(\vec{x}_0) \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) + \mathcal{O}(\vec{x} - \vec{x}_0)^2, \quad (2.41)$$

mit der Jacobimatrix $J_{\vec{f}}^{ij}(\vec{x}_0) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{x}_0)$. Die allgemeine Lösung dieser linearisierten Gleichung besteht aus einer linearen Superposition von Exponentialfunktionen, deren Koeffizienten durch die Eigenwerte von $J_{\vec{f}}(\vec{x}_0)$ gegeben sind. Ist der Realteil aller Eigenwerte negativ, so ist der betrachtete Fixpunkt stabil. Existiert mindestens ein Eigenwert mit positivem Realteil, handelt es sich um einen instabilen Fixpunkt.

Die Eigenwerte der Jacobimatrix eines zweidimensionalen dynamischen Systems lauten

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \left(\tau \pm \sqrt{\tau^2 - 4\Delta} \right), \quad (2.42)$$

mit $\tau = \text{Sp}(J_{\vec{f}}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{f} = \frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y}$ und $\Delta = \det(J_{\vec{f}}) = \frac{\partial f_1}{\partial x} \frac{\partial f_2}{\partial y} - \frac{\partial f_2}{\partial x} \frac{\partial f_1}{\partial y}$.

Die Stabilität eines Fixpunkts ist also allein durch die Größe τ und somit durch die Divergenz des Vektorfelds \vec{f} bestimmt.

Schreibt man (2.42) als

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \left(\tau \pm \sqrt{\left(\frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{\partial f_2}{\partial y} \right)^2 + 4 \frac{\partial f_2}{\partial x} \frac{\partial f_1}{\partial y}} \right), \quad (2.43)$$

sieht man sofort, dass komplexe Eigenwerte nur dann auftreten können, wenn der zweite Term unter der Wurzel negativ wird. Hierzu müssen beide Faktoren ein unterschiedliches Vorzeichen aufweisen, was insbesondere bedeutet, dass $\vec{\nabla} \times \vec{f} = \frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial y} \neq 0$ sein muss. Komplexe Eigenwerte, die mit Spiralen und Zentren assoziiert sind, können also nur auftreten, wenn die Rotation des Vektorfelds am Ort des Fixpunkts nicht verschwindet.

Auf ähnliche Weise lässt sich auch zeigen, dass Fixpunkte eines divergenzfreien Vektorfelds $\vec{v}(\vec{x})$ nur Sattelpunkte oder Zentren sein können: In divergenzfreien Vektorfeldern gilt $\tau = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ und die Eigenwerte lauten

$$\lambda_{1/2} = \pm \sqrt{-\Delta}, \quad (2.44)$$

was, je nach Vorzeichen von Δ , entweder einem Paar reeller Zahlen mit unterschiedlichem Vorzeichen (Sattelpunkt) oder einem Paar komplex konjugierter Zahlen mit verschwindendem Realteil (Zentrum) entspricht.

2.7 Bifurkationen

Verändert man die Parameter eines gegebenen dynamischen Systems, so ändert sich zunächst die Lage der Fixpunkte des Systems sowie die Geschwindigkeit mit der die Trajektorie diese Fixpunkte erreicht. Da $\vec{f}(\vec{x})$ jedoch im Allgemeinen eine nichtlineare Funktion darstellt, sind auch wesentlich drastischere Änderungen der Dynamik möglich, wenn Parameterwerte des Systems verändert werden. So können Fixpunkte ihre Stabilität ändern, aus dem Nichts neu entstehen oder vergehen. Dieses Phänomen wird als *Bifurkation* bezeichnet.

2.7.1 Sattelknotenbifurkation

Eine der einfachsten und zugleich am häufigsten auftretenden Bifurkationen stellt die *Sattelknotenbifurkation* dar. Hier verschmilzt ein stabiler Fixpunkt mit einem instabilen Fixpunkt (bzw. Sattel in >1 Dimension) und beide löschen sich gegenseitig aus. Durchfährt man den Bifurkationsparameter in umgekehrter Richtung entstehen ein stabiler und ein instabiler Fixpunkt (Sattel in >1 Dimension) aus dem Nichts. Das einfachste Gleichungssystem, das eine Sattelknotenbifurkation durchlaufen kann, lautet

$$\dot{x} = r - x^2. \quad (2.45)$$

Da sich jedes System mit einer Sattelknotenbifurkation durch Taylorentwicklung um den Bifurkationspunkt und Umskalieren auf diese Form bringen lässt, spricht man hierbei von der *Normalform* der Bifurkation.

Wie man leicht sieht, besitzt das System (2.45) für $r > 0$ zwei Fixpunkte bei $x_{1/2} = \pm\sqrt{r}$, die für $r < 0$ verschwinden. Für gewöhnlich besitzen Systeme, in denen Sattelknotenbifurkationen auftreten, noch mindestens einen weiteren Attraktor, der unabhängig vom Wert des Bifurkationsparameters immer existiert. Befindet sich das System anfangs auf einem Fixpunkt, der durch die Bifurkation zerstört wird, springt die Trajektorie am Bifurkationspunkt auf diesen zweiten Attraktor. Dieser plötzliche Übergang wird als *Katastrophe* bezeichnet.

2.7.2 Hopfbifurkation

Bei der (superkritischen) Hopfbifurkation verwandelt sich ein stabiler Fixpunkt in einen instabilen Fixpunkt, der von einem Grenzyklus umgeben ist. Da Grenzyklen erst für $D \geq 2$ Dimensionen auftreten können, ist auch die Hopfbifurkation nur in mehrdimensionalen Systemen möglich. Ihre Normalform lautet

$$\dot{r} = \mu r - r^3 \quad (2.46)$$

$$\dot{\varphi} = \omega + br^2. \quad (2.47)$$

Unterhalb des Bifurkationspunkts bei $\mu = 0$ existiert eine stabile Spirale am Ursprung. Für $\mu > 0$ wird diese Spirale instabil und ein stabiler Grenzyklus entsteht bei $r = \sqrt{\mu}$.

2.7.3 Stochastische Bifurkationen

Während sich die oben vorgestellten Bifurkationen auf deterministische Modelle beziehen, die sich als dynamisches System schreiben lassen, lassen sich analog auch in stochastischen Systemen Bifurkationen definieren. Hierbei unterscheidet man grob zwischen zwei Klassen von Bifurkationen: Bei *d-Bifurkationen* oder dynamischen Bifurkationen, spaltet sich die Dynamik eines stochastischen Prozesses in zwei oder mehrere Subsysteme auf, wobei jede Trajektorie des Systems unwiederbringlich in einem der beiden Subsysteme gefangen ist und ein Wechsel zwischen diesen beiden Zuständen jenseits des Bifurkationspunkts nicht mehr möglich ist. Phänomenologische Bifurkationen oder *p-Bifurkationen* hingegen zeichnen sich dadurch aus, dass in der Wahrscheinlichkeitsdichte des Systems neue Wahrscheinlichkeitsextrema entstehen oder vergehen, beispielsweise also ein System mit nur einem bevorzugten Zustand bimodal wird. Im Gegensatz zur d-Bifurkation ist hierbei jedoch ein Wechsel der Trajektorien zwischen den beiden bevorzugten Zuständen jederzeit möglich [28, 48].

Eine wichtige Voraussetzung für das Auftreten dynamischer Bifurkationen ist, dass das zugrunde liegende stochastische dynamische System multiplikatives Rauschen aufweist, die Fluktuationen des Systems also proportional zur Teilchenzahl x sind. Der Bifurkationspunkt, an dem die d-Bifurkation auftritt, befindet sich dann an einem Ort x_0 , an dem das Rauschen verschwindet. Aufgrund der positiven Definitheit der Diffusionsmatrix kann dies aber in chemischen Reaktionsnetzwerken lediglich am Ort $x_0 = 0$ der Fall sein. Da der Bereich negativer Teilchenzahlen allerdings keine physikalische Relevanz besitzt, können d-Bifurkationen im Rahmen chemischer Reaktionsnetzwerke im Allgemeinen nicht beobachtet werden. Es ist daher ausreichend, sich bei der Analyse stochastischer Bifurkationen in solchen Systemen auf phänomenologische Bifurkationen zu beschränken. [28, 34]

2.8 Mittelwertsverschiebung

Die Näherung der Mastergleichung als dynamisches System kann auch als eine Näherung der aus der Mastergleichung gewonnenen Fokker-Planck-Gleichung betrachtet werden. Selbstverständlich gibt es auch hier alternative Näherungsmethoden, bei denen versucht wird, höhere Terme aus der Fokker-Planck-Gleichung zu berücksichtigen [20, 22, 24, 49]. Von diesen Methoden ist die Mittelwertsverschiebung von besonderem Interesse, da hier besonders deutlich wird, wo die Grenzen einer Näherung der Fokker-Planck-Gleichung als dynamisches System liegen, wie wir sie auch im Rahmen dieser Arbeit durchführen werden.

Um die Mittelwertsverschiebung herzuleiten, denken wir zunächst an ein beliebiges eindimensionales Reaktionssystem mit unimodaler Wahrscheinlichkeitsverteilung und starten mit der eindimensionalen Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x)p(x,t)] + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x)p(x,t)] . \quad (2.48)$$

Multiplizieren mit x und integrieren von $x = 0$ bis ∞ liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\infty x \cdot p(x,t) dx &= - \int_0^\infty x \frac{\partial}{\partial x} [f(x)p(x,t)] dx + \frac{1}{2N} \int_0^\infty x \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x)p(x,t)] dx \\ \Rightarrow \langle \dot{x} \rangle &= \langle f(x) \rangle + \frac{D(0)}{2N} p(0) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \langle f(x) \rangle . \end{aligned} \quad (2.49)$$

Hierbei entfallen die Randterme der partiellen Integration, da $p(\infty, t) = p'(\infty, t) = 0$ gilt.

Bei genauerer Betrachtung fällt auf, dass die resultierende Gleichung für den zeitlichen Verlauf des Mittelwerts nur dann einem dynamischen System entspricht, wenn $f(x)$ linear ist. Dann lässt sich nämlich

$$\langle \dot{x} \rangle = \langle f(x) \rangle = f(\langle x \rangle) \quad (2.50)$$

schreiben.

Beinhaltet $f(x)$ jedoch auch nichtlineare Beiträge, lässt sich die Zeitentwicklung des Mittelwerts von x nicht mehr so einfach als dynamisches System schreiben. Machen wir uns anhand eines Beispiels klar, was das für die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung bedeutet. Für $f(x) = r - x$ und $D(x) = 1$ ergibt sich gemäß (2.33) die analytische Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung

$$p_s(x) = A \exp \left(2N \left(rx - \frac{1}{2} x^2 \right) \right) \quad (2.51)$$

$$= \tilde{A} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(x-r)^2}{1/(2N)} \right) , \quad (2.52)$$

$$(2.53)$$

was einer Gaußverteilung um den Fixpunkt der deterministischen Drift bei $x = r$ entspricht.

Hierbei haben wir den Exponenten durch quadratische Ergänzung und herausziehen des absoluten Terms auf die Form einer Gaußverteilung gebracht. Dieses Vorgehen ist immer

möglich, solange der Exponent maximal quadratisch in x ist, d.h. (im Fall von konstanter Diffusion) $f(x)$ linear ist. Beinhaltet $f(x)$ allerdings auch nichtlineare Terme, ergeben sich höhere Terme im Exponenten, die die Gaußkurve verzerren. Während sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte p_s in der Nähe eines Fixpunkts von $f(x)$ dann weiterhin als gaußförmig nähern lässt, ergeben sich mit zunehmenden Abstand vom Fixpunkt Abweichungen von der symmetrischen Glockenkurve. Die Verteilung wird schief.

Es ist klar, dass sich bei einer solch schiefen Verteilung auch der Mittelwert verändert und dann im Allgemeinen nicht mehr im Zentrum der gaußgenäherten Kurve am Fixpunkt von $f(x)$ liegt. Diese *Mittelwertsverschiebung* stellt somit eine einfache stochastische Korrektur dar, mit deren Hilfe sich die Näherung der Fokker-Planck-Gleichung als dynamisches System verbessern lässt.

Ein Extremfall dieses Phänomens lässt sich in Systemen mit multimodaler Wahrscheinlichkeitsverteilung beobachten. Wie aus den obigen Überlegungen um (2.53) hervor geht, können diese in eindimensionalen Systemen nur dann auftreten, wenn nichtlineare Terme in $f(x)$ vorhanden sind. In diesem Fall ist der Einfluss dieser Nichtlinearitäten so stark, dass der Mittelwert der Verteilung überhaupt keine sinnvollen Aussagen zu den Fixpunkten des Systems mehr zulässt. In diesem Fall macht auch eine Berechnung der Mittelwertsverschiebung wenig Sinn, da der Mittelwert gegenüber den $\vec{f}(x)$ -Fixpunkten nicht nur verschoben ist, sondern gänzlich entkoppelt.

Um die Mittelwertsverschiebung für ein unimodales System explizit zu berechnen, starten wir diesmal mit der eindimensionalen stationären Fokker-Planck-Gleichung und bilden die Stammfunktion bezüglich x :

$$f(x)p(x) = \frac{1}{2N} \frac{\partial}{\partial x} (D(x)p(x)) . \quad (2.54)$$

Nun entwickeln wir $f(x)$ um den deterministischen Fixpunkt x_s :

$$\left(\underbrace{f(x_s)}_0 + f'(x_s)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x_s)\Delta x^2 \right) p(x) = \frac{1}{2N} \frac{\partial}{\partial x} (D(x)p(x)) , \quad (2.55)$$

mit der Abkürzung $\Delta x = x - x_s$. Integrieren über x und Umstellen liefert

$$f'(x_s) \underbrace{\int_0^\infty \Delta x \cdot p(x) dx}_{\langle \Delta x \rangle} = -\frac{1}{2}f''(x_s) \underbrace{\int_0^\infty \Delta x^2 \cdot p(x) dx}_{\langle \Delta x^2 \rangle} + \frac{1}{2N} \underbrace{\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} (D(x)p(x)) dx}_{\text{const.}} . \quad (2.56)$$

Den letzten Term können wir für ausreichend große N vernachlässigen und erhalten

$$\langle \Delta x \rangle = -\frac{f''(x_s)}{2f'(x_s)} \langle \Delta x^2 \rangle . \quad (2.57)$$

Um das zweite Moment $\langle \Delta x^2 \rangle$ zu berechnen, multiplizieren wir (2.55) zunächst mit Δx , bevor wir über diese Größe integrieren. Weiterhin brechen wir die Taylorentwicklung von

$f(x)$ nach dem linearen Glied ab und nähern $D(x) = D(x_s)$ als Konstante. Hieraus ergibt sich

$$\begin{aligned} f'(x_s) \langle \Delta x^2 \rangle &= \frac{1}{2N} \int_0^\infty \Delta x \frac{\partial}{\partial x} (D(x_s) p(x)) dx = -\frac{1}{2N} D(x_s) \\ \Rightarrow \langle \Delta x^2 \rangle &= -\frac{1}{2N} \frac{D(x_s)}{f'(x_s)}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Wir erhalten also für die Mittelwertsverschiebung

$$\langle \Delta x \rangle = \frac{1}{4N} D(x_s) \frac{f''(x_s)}{f'(x_s)^2}. \quad (2.59)$$

Die Verschiebung des Mittelwerts steigt also mit der Diffusionsstärke sowie der Krümmung $f''(x)$ der deterministischen Drift an und nimmt quadratisch mit deren Steigung $f'(x)$ sowie der Systemgröße N ab. Insbesondere ergibt sich für Systeme mit linearer Drift $f''(x) = 0$, sodass die Mittelwertsverschiebung verschwindet.

Basierend auf ähnlichen Konzepten lassen sich natürlich auch ausgefallener Korrekturen berechnen, die beispielsweise noch höhere Terme in x berücksichtigen, die Konzentrationsabhängigkeit der Diffusion mit berücksichtigen oder auch auf den zeitabhängigen Mittelwert der Verteilung anwendbar sind. Beispiele für solche Korrekturen sind unter anderem in [22, 24] zu finden.

3 Charakterisierung eindimensionaler stochastischer Systeme anhand der Wahrscheinlichkeitsmaxima

3.1 Auf der Suche nach einfachen Größen zur Charakterisierung stochastischer Systeme

Zur deterministischen Beschreibung eines gegebenen Reaktionssystems stehen zahlreiche Methoden aus der Theorie der dynamischen Systeme zur Verfügung: Die lineare Stabilitätsanalyse liefert Lage und Stabilität der Fixpunkte. Über Phasenportraits und Nullklinen lassen sich auch andere Arten von Attraktoren identifizieren und deren Einzugsbereich abschätzen. Bifurkationsanalysen und Stabilitätsdiagramme geben Auskunft über die Robustheit der vorhandenen Attraktoren gegenüber Parameteränderungen sowie über die möglichen stationären Zustände des Systems in Abhängigkeit der Parameter.

Zur Untersuchung stochastischer Systeme können all diese Methoden jedoch zunächst nicht angewandt werden. Während der Formalismus der dynamischen Systeme es also erlaubt, deterministische Systeme in der Regel ganz ohne Lösen der Differentialgleichung (2.39) zu verstehen, lässt sich das Lösen von Differentialgleichungen bei der Untersuchung stochastischer Modelle in der Regel kaum vermeiden. Zusätzlich wird ein solches Lösen noch dadurch erschwert, dass – während es sich bei dynamischen Systemen grundsätzlich um gewöhnliche Differentialgleichungssysteme erster Ordnung handelt – die Mastergleichung eine Integro-Differentialgleichung und die Fokker-Planck-Gleichung eine partielle Differentialgleichung darstellt.

Dieser signifikante Unterschied, der sowohl das anschauliche Verständnis als auch die mathematische Lösbarkeit der zugrunde liegenden Gleichungen betrifft, dürfte sicherlich einer der Hauptgründe dafür darstellen, weshalb sich deterministische Modelle einer solchen Beliebtheit erfreuen während stochastische Modelle häufig gemieden werden. Dies führt dazu, dass deterministische Gleichungen teilweise auch zur Beschreibung von Systemen mit vergleichsweise wenigen Konstituenten herangezogen werden, ohne dass genau hinterfragt wird, inwieweit stochastische Effekte bereits eine Rolle spielen könnten [10, 30–33].

Es ist daher von besonderem wissenschaftlichem Interesse, Methoden zu entwickeln mit deren Hilfe sich stochastische Systeme mit möglichst geringem mathematischem Aufwand analysieren und möglichst intuitiv verstehen lassen. In der Literatur sind einige solcher Methoden zu finden, die häufig in Gestalt einer stochastischen Korrektur für die Beschreibung als dynamisches System auftreten [22, 24]. In Abschnitt 2.8 haben wir bereits die Mittelwertsverschiebung als eine der einfachsten stochastischen Korrekturen kennengelernt.

Um die im Allgemeinen höhere Komplexität einer stochastischen Beschreibung zu reduzieren und besser handhabbar zu machen, ist es in der Regel nötig, die hochdimensionale Information, die in der jeweiligen Verteilungsfunktion kodiert ist, auf einige wenige Kenngrößen, wie beispielsweise den Mittelwert und die Standardabweichung der Verteilung, zu kondensieren. Hierbei ist es zudem oft wünschenswert, dass sich die durch diese Vereinfachung ergebenden Gleichungen in Form eines dynamischen Systems schreiben lassen. Es ist daher naheliegend, solche Methoden als eine Korrektur der deterministischen Fixpunkte, die in linearer Näherung dem Mittelwert der Verteilung entsprechen, aufzufassen, wie es unter anderem beim Beispiel der Mittelwertsverschiebung auch der Fall ist. Dies ist jedoch für multimodale Verteilungen problematisch.

Wir wollen hier daher einen anderen Weg einschlagen und uns anstelle des Mittelwertes auf die Lage der Maxima und Minima des Systems konzentrieren. Während der Mittelwert eines unimodalen stochastischen Systems als eine Art natürliche Verallgemeinerung des deterministischen Fixpunkts angesehen werden kann, scheinen die Maxima und Minima des Systems zunächst eine eher exotische Wahl darzustellen. Tatsächlich kann man aber auch diese als eine alternative, natürliche Verallgemeinerung der Fixpunkte eines dynamischen Systems ansehen. Insbesondere konvergieren die Maxima der Fokker-Planck-Gleichung für $N \rightarrow \infty$, also für große Systeme, gegen die Fixpunkte des dynamischen Systems. Während der Mittelwert zwar rein anschaulich bessere Vorhersagen für unimodale Systeme trifft, stellen die Maxima und Minima der Fokker-Planck-Gleichung für multimodale Systeme wesentlich aussagekräftigere Kenngrößen dar. Diese Tatsache ist in Abb. 3.1 anhand zweier beispielhafter Verteilungen dargestellt.

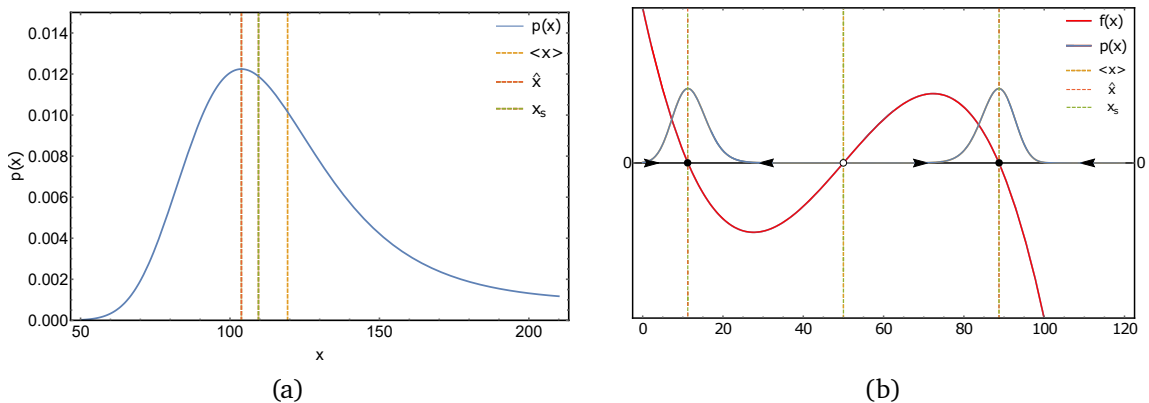


Abbildung 3.1 Links: Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x)$, Mittelwert $\langle x \rangle$, deterministischer Fixpunkt x_s und Maximum \hat{x} in einem System mit unimodaler, schiefer Wahrscheinlichkeitsdichte. Rechts: Deterministische Drift $f(x)$, Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x)$, Mittelwert $\langle x \rangle$, deterministische Fixpunkte x_s und Maxima \hat{x} in einem System mit bimodaler Wahrscheinlichkeitsdichte. Während im linken System der Mittelwert als geeignetere Kenngröße für den Zustand des Systems erscheint, wird die Wahrscheinlichkeitsdichte des rechten Systems durch die Angabe der Extrema eindeutig besser repräsentiert.

Insbesondere lassen sich mithilfe der Maxima und Minima des Systems auch p-Bifurkationen der Verteilung auf sehr elegante Weise untersuchen. Solche Untersuchungen werden uns im Laufe dieser Arbeit noch sehr häufig begegnen.

3.2 Das Konvektionsfeld

In Abschnitt 2.4.3 haben wir bereits das Konvektionsfeld

$$\alpha = f(x) - \frac{1}{2N}D'(x) \quad (3.1)$$

kennen gelernt, dessen Nullstellen die Maxima und Minima der eindimensionalen Fokker-Planck-Gleichung angeben [18]. Wie man sofort sieht, geht für $N \rightarrow \infty$, also für große Systeme, das Konvektionsfeld gegen die deterministische Drift $f(x)$. Somit lässt sich das Konvektionsfeld als eine Art stochastisch korrigierte Drift ansehen. Die stochastischen Korrekturen stammen hierbei aus der Ortsabhängigkeit der Diffusion, im Gegensatz zum Beispiel zur Mittelwertsverschiebung, die durch nichtlineare Terme in $f(x)$ hervorgerufen wird. Betrachtet man die Differentialgleichung

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(x) , \quad (3.2)$$

lassen sich die Maxima und Minima der Fokker-Planck-Gleichung als Fixpunkte des so definierten dynamischen Systems auffassen. Während die Trajektorien dieses dynamischen Systems zunächst keine anschauliche Bedeutung besitzen – insbesondere geben diese nicht den korrekten zeitlichen Verlauf der Extrema der Fokker-Planck-Gleichung wieder – lassen sich typische Methoden aus der Theorie der dynamischen Systeme dennoch erfolgreich anwenden.

3.2.1 Lineare Stabilitätsanalyse des Konvektionsfelds

Als erste dieser Methoden wollen wir die lineare Stabilitätsanalyse auf einen Fixpunkt x_0 von α anwenden. Wir starten hierzu mit der Stationaritätsbedingung (2.30) und leiten nach x ab:

$$f'(x)p_s(x) + f(x)p'_s(x) - \frac{1}{2N} \left(D''(x)p_s(x) + 2D'(x)p'_s(x) + D(x)p''_s(x) \right) . \quad (3.3)$$

Am Ort eines p_s -Extremums entfallen die p'_s -Terme und wir können schreiben

$$p''_s(x) = \frac{2N}{D(x)} \underbrace{\left(f'(x) - \frac{1}{2N}D''(x) \right)}_{\alpha'(x)} p_s(x) . \quad (3.4)$$

Bis auf $\alpha'(x)$ sind alle Terme positiv, sodass gilt

$$\text{sign}(p''_s(x)) = \text{sign}(\alpha'(x)) . \quad (3.5)$$

Dies bedeutet, dass stabile α -Fixpunkte mit p_s -Maxima, instabile α -Fixpunkte mit p_s -Minima assoziiert sind. Wir können also lineare Stabilitätsanalyse nutzen, um die Art des jeweiligen p_s -Extremums zu berechnen [18].

3.2.2 Bifurkationen des Konvektionsfelds

Bifurkationsanalysen des Konvektionsfeldes ermöglichen eine besonders einfache und elegante Untersuchung stochastischer p -Bifurkationen, bei denen sich die Wahrscheinlichkeitsdichte p_s qualitativ ändert, also beispielsweise Maxima und Minima entstehen und vergehen. Da stabile α -Fixpunkte Wahrscheinlichkeitsmaxima und instabile α -Fixpunkte Wahrscheinlichkeitsminima entsprechen, stellt eine Sattelnodenbifurkation in α eine p -Bifurkation dar, bei der ein Maximum-Minimum-Paar in p_s entsteht bzw. vergeht. Eine solche Bifurkationsanalyse anhand des Konvektionsfeldes wurde bereits in [41] von Erban et al. zur Untersuchung stochastischer p -Bifurkationen vorgeschlagen.

3.3 Schubhaftes Rauschen im Schlögl-Modell

Wir wollen nun anhand eines Beispiels sehen, wie das Konvektionsfeld genutzt werden kann, um rauschinduzierte p -Bifurkationen zu untersuchen. Hierzu betrachten wir eine Variante des sogenannten Schlögl-Modells [50]. Hierbei handelt es sich um ein trimolekulares chemisches Reaktionsmodell, welches das einfachste eindimensionale bistabile System darstellt [51].

Die Ergebnisse dieses Abschnitts wurden in Zusammenarbeit mit Johannes Falk erarbeitet und bereits in dessen Dissertation [52] sowie im Rahmen einer gemeinsamen Publikation [42] veröffentlicht. Hierbei wurden die Auswahl des Modells sowie die numerischen Bifurkationsanalysen von J. Falk durchgeführt, während die analytische Rechnung anhand des impliziten Funktionensatzes auf meine Idee zurück geht und von beiden Autoren in enger Zusammenarbeit durchgeführt wurde.

3.3.1 Das Schlögl-Modell

Die Reaktionsgleichungen des Schlögl-Modells lauten



Für Drift und Diffusion ergeben sich hieraus

$$f(x) = k_1 - k_2x + k_3x^2 - k_4x^3 \quad (3.7)$$

$$D(x) = k_1 + k_2x + k_3x^2 + k_4x^3, \quad (3.8)$$

sodass sich schließlich ein Konvektionsfeld von

$$\alpha(x) = k_1 - \frac{k_2}{2} - (k_2 + k_3)x + \left(k_3 - \frac{3}{2}k_4\right)x^2 - k_4x^3 \quad (3.9)$$

ergibt. Der Einfachheit halber wurde bei allen hier aufgeführten Untersuchungen des Schlögl-Modells eine Systemgröße von $N = 1$ angenommen.

Abhängig von den gewählten Parameterwerten besitzt diese Größe eine, zwei oder drei Nullstellen, was entweder einem einzelnen Maximum oder zwei Maxima mit einem dazwischenliegenden Minimum in der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte $p_s(x)$ entspricht. Zwischen diesen beiden Konfigurationen durchläuft das System eine Sattelknotenbifurkation, die sich beispielsweise beim Durchfahren des effektiven Parameters $\tilde{k}_3 = k_3/k_4$ zeigt.

Obwohl es grundsätzlich möglich ist, die Nullstellen von (3.9) analytisch zu berechnen, ergibt sich aufgrund der x^3 -Terme ein äußerst länglicher Ausdruck, den wir hier nicht explizit wiedergeben wollen. Stattdessen betrachten wir die explizite Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung nach (2.33). Das auftretende Integral lässt sich hier allerdings nur numerisch lösen.

Abb. 3.2 zeigt die resultierende Wahrscheinlichkeitsdichte sowie Histogramme, die aus Gillespie-Simulationen des Reaktionssystems (3.6) gewonnen wurden, für verschiedene Werte von \tilde{k}_3 .

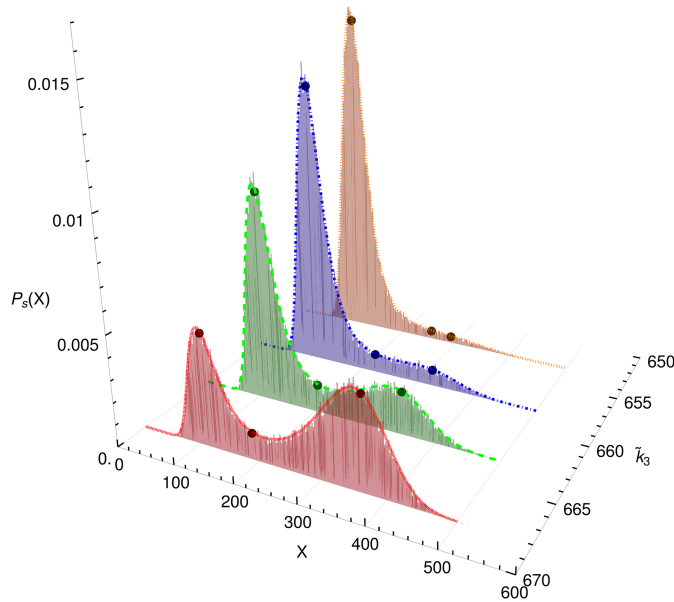


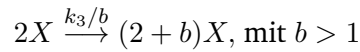
Abbildung 3.2 Vergleich zwischen stationärer Lösung der Fokker-Planck-Gleichung (durchgezogene Linie), Histogrammdata aus Gillespie-Simulation der Mastergleichung und Fixpunkten des deterministischen Modells (dunkle Punkte) für verschiedene Werte des Parameters $\tilde{k}_3 = k_3/k_4$. Die übrigen Parameter lauten: $k_1 = 8 \cdot 10^6$; $k_2 = 1,33 \cdot 10^5$; $k_4 = 1$.

Zusätzlich beinhaltet Abb. 3.2 auch die Lage der deterministischen Fixpunkte des Modells. Auffällig ist, dass das deterministische Modell beispielsweise für $k_3 = 653$ noch drei Fixpunkte besitzt, während sowohl die stochastische Simulation der Mastergleichung als auch die stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung ein unimodales Verhalten aufweisen. Es lässt sich also bereits anhand dieses ersten Beispiels sagen, dass die Extrema der Fokker-Planck-Gleichung, die sich mithilfe des Konvektionsfeldes berechnen lassen, das Verhalten des zugrunde liegenden stochastischen Systems deutlich besser erfassen können als die rein deterministische Beschreibung als dynamisches System. Dennoch lässt sich auch anhand des Konvektionsfeldes nicht feststellen, wie sich das relative Gewicht der jeweiligen Maxima

verhält. Für $\tilde{k}_3 = 658$ können wir somit auch anhand des Konvektionsfelds nur feststellen, dass mehrere Maxima vorliegen, nicht jedoch, dass das Maximum bei $X \approx 150$ bei Weitem überwiegt.

3.3.2 Das Schlögl-Modell mit schubhaftem Rauschen

Wir wollen nun eine modifizierte Variante des Schlögl-Modells betrachten, bei der wir die dritte Reaktion in (3.6) in



abändern, um eine schubhafte Erzeugung der Substanz X zu erreichen. Hierbei teilen wir die Reaktionsrate k_3 durch die Anzahl b der erzeugten Teilchen pro Schub. Hierdurch nimmt der Parameter b keinen Einfluss auf die deterministische Drift, die somit die gleiche bleibt wie im unmodifizierten Schlögl-Modell.

Die Diffusion lautet nun allerdings

$$D(x) = k_1 + k_2x + bk_3x^2 + k_4x^3 \quad (3.10)$$

und das Konvektionsfeld

$$\alpha(x) = k_1 - \frac{k_2}{2} - (k_2 + bk_3)x + \left(k_3 - \frac{3}{2}k_4\right)x^2 - k_4x^3. \quad (3.11)$$

Obwohl der neue Parameter b also keinen Einfluss auf das deterministische Modell nimmt, werden Lage und Stabilität der Fixpunkte der Fokker-Planck-Gleichung sehr wohl beeinflusst. Abb. 3.3 zeigt analog zur obigen Abbildung die Lösungen der stationären Fokker-Planck-Gleichung zusammen mit den entsprechenden Gillespie-Histogrammen sowie den Fixpunkten des deterministischen Modells für unterschiedliche Werte des Parameters b .

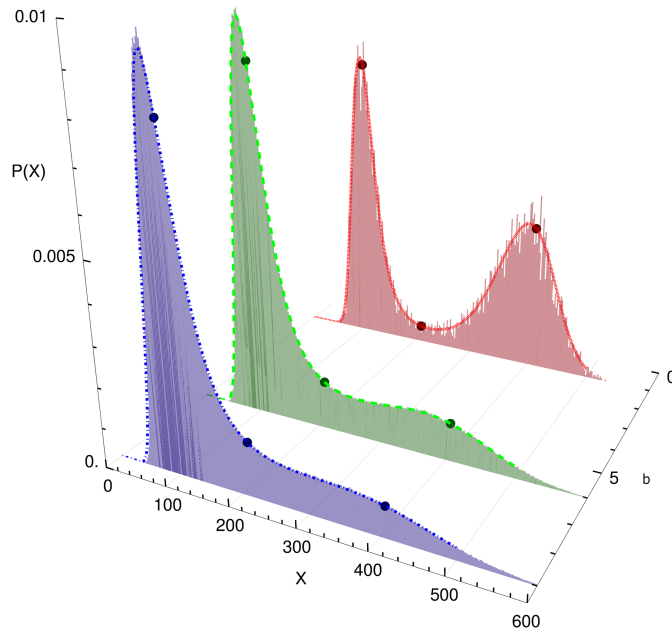


Abbildung 3.3 Vergleich zwischen stationärer Lösung der Fokker-Planck-Gleichung (durchgezogene Linie), Histogrammdaten aus Gillespie-Simulationen der Mastergleichung und Fixpunkten des deterministischen Modells (dunkle Punkte) für verschiedene Werte des Parameters b . Die übrigen Parameter lauten: $k_1 = 8 \cdot 10^6$, $k_2 = 1,33 \cdot 10^5$, $k_3 = 720$, $k_4 = 1$.

Während sich die Verteilung für $b = 1$ noch ganz klar bimodal darstellt, nimmt der obere Peak mit steigendem b immer weiter ab, bis schließlich für $b = 9$ nur noch ein einzelner Peak mit sehr langer, asymmetrischer Schulter vorliegt. Das schubhafte Rauschen führt hier also dazu, dass ein bistabiles System monostabil wird. Interessant ist hierbei vor allem die Tatsache, dass diese Bifurkation vom Konvektionsfeld ebenso korrekt erfasst wird, wie die Bifurkation bei Durchfahren des Parameters \tilde{k}_3 , wohingegen die deterministische Drift überhaupt nicht vom Schubgrößenparameter b beeinflusst wird.

Bislang haben wir zwar jeweils das Konvektionsfeld α hergeleitet, jedoch aufgrund der auftretenden x^3 -Terme dessen Nullstellen nicht explizit berechnet. Stattdessen wurde jeweils die numerische Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung geplottet und diese mit den deterministischen Fixpunkten verglichen.

Grundsätzlich ist jedoch festzuhalten, dass eine analytische Berechnung der Nullstellen des Konvektionsfeldes im Schlögl-Modell möglich ist, nicht jedoch der Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung. Zudem lassen sich anhand des Konvektionsfeldes weitergehende Untersuchungen anstellen, die sich anhand von numerischen Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung äußerst umständlich gestalten würden. Ein Beispiel hierfür ist die stochastische Bifurkationsanalyse, auf die wir im nächsten Abschnitt eingehen werden.

3.3.3 Bifurkationsanalyse anhand des Konvektionsfeldes

Wir haben in Abschnitt 3.2.2 bereits gesehen, dass eine Sattelknotenbifurkation im Konvektionsfeld α , einer stochastischen p -Bifurkation der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte entspricht, bei der sich ein Maximum und ein Minimum der Verteilung gegenseitig auslöschen.

Anhand von Bifurkationsdiagrammen von α sollte daher eine systematische Untersuchung der möglichen p -Bifurkationen des Systems möglich sein. Mithilfe dieser Technik wollen wir nun untersuchen, welche Arten von Bifurkationen beim Durchfahren der verschiedenen Systemparameter auftreten können.

Hierzu setzen wir (3.11) gleich 0 und lösen für verschiedene Parametersätze $\{k_1, k_2, k_3, b\}$ nach x . Die so erhaltenen Fixpunkte tragen wir dann über je einen Bifurkationsparameter k_i auf, um das entsprechende Bifurkationsdiagramm zu erhalten (siehe Abb. 3.4). Hierbei beinhaltet jede Subgrafik gleichzeitig mehrere Bifurkationsdiagramme mit jeweils unterschiedlichem Schubgrößenparameter b .

Während die Bifurkationslinien in Abb. 3.4 (b) eine Sattelknotenbifurkation beim Durchfahren des Bifurkationsparameters $\tilde{k}_2 = k_2/k_4$ anzeigen, die unabhängig vom Schubgrößenparameter b ist, ist in Abb. 3.4 (a) ein weiterer Fall dargestellt, beim dem durch eine Vergrößerung von b eine Sattelknotenbifurkation, bei der ein Maximum und ein Minimum der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s verschmelzen, zerstört wird. Der für kleine Rauschstärken mögliche bistabile Systemzustand wird hier also durch eine Erhöhung des intrinsischen Rauschens unterdrückt.

Im Gegensatz dazu zeigt Abb. 3.4 (c) den Fall, dass ein deterministisch monostabiles System aufgrund des Rauschens bistabil wird. Dieses zunächst eher unintuitiv wirkende Resultat bestätigt sich auch anhand stochastischer Simulationen, wie die Zeitreihe in Abb. 3.5 zeigt.

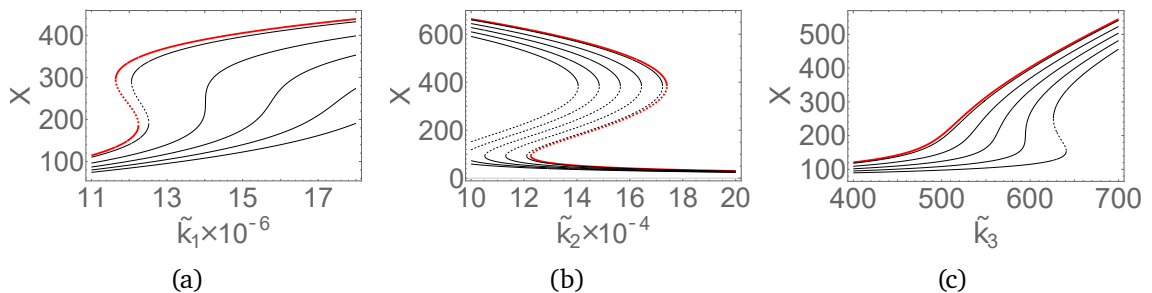


Abbildung 3.4 Bifurkationsdiagramme des Schlögl-Modells für verschiedene Bifurkationsparameter und Schubgrößenparameter b . Durchgezogene Linien stehen für stabile, gestrichelte Linien für instabile Fixpunkte. Die rote Linie zeigt das deterministische Bifurkationsdiagramm nach $f(x)$, die schwarzen Linien verschiedene stochastische Bifurkationsdiagramme nach $\alpha(x)$, für jeweils verschiedene Schubgrößenparameter b . Von links nach rechts ist $b = 1, 11, 21, \dots$

(a) Bifurkationsparameter $\tilde{k}_1 = k_1/k_4$: Sattelknotenbifurkation im deterministischen Modell verschwindet für große Rauschstärken.

(b) Bifurkationsparameter $\tilde{k}_2 = k_2/k_4$: Zwei Sattelknotenbifurkationen im deterministischen sowie im stochastischen Modell. Erhöhung von b verschiebt lediglich die Bifurkationspunkte.

(c) Deterministisch monostabiles System wird für große Rauschstärken bistabil.

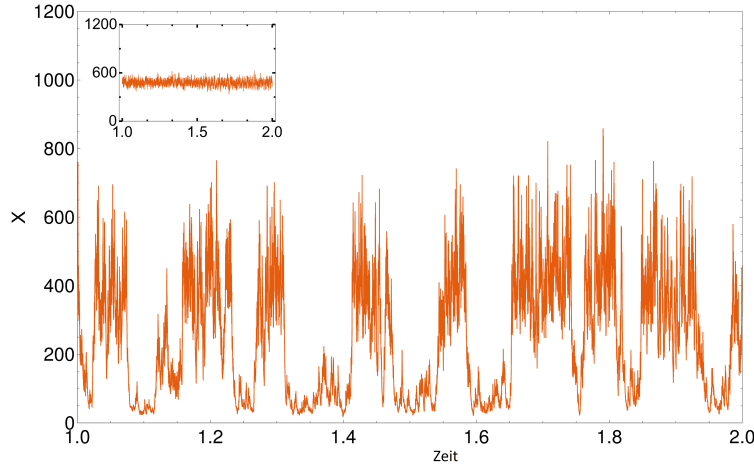


Abbildung 3.5 Zeitentwicklung des Schlögl-Modells mit Parametersatz $k_1 = 3 \cdot 10^6$; $k_2 = 7751$; $k_3 = 601$ und Schubgrößenparameter $b = 25$. Aus der Zeitreihe geht klar hervor, dass sich das System in einem bistabilen Zustand befindet, mit den beiden Fixpunkten bei $X_1 = 43$ und $X_2 = 376$. Im Inset ist das gleiche System mit $b = 1$ gezeigt, das lediglich einen einzelnen Fixpunkt bei $X = 438$ aufweist.

Der Einfluss des Schubgrößenparameters b lässt sich auch rein analytisch abschätzen, ohne dass die Fixpunkte von α berechnet werden müssen. Hierzu wenden wir den impliziten Funktionensatz auf die Gleichung $\alpha(x) = 0$ an und setzen die Definition des Konvektionsfelds (3.1) ein. Hieraus ergibt sich

$$\frac{\partial k_i}{\partial b}(x, b) = - \left(\frac{\partial \alpha(x, k_i, b)}{\partial k_i} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial \alpha(x, k_i, b)}{\partial b} \quad (3.12)$$

$$= \frac{\frac{\partial^2 B(x, k_i, b)}{\partial x \partial b}}{2 \frac{\partial A}{\partial k_i} - \frac{\partial^2 B}{\partial k \partial x}} \quad (3.13)$$

Konkret für das Schlögl-Modell erhalten wir

$$\frac{\Delta k_1}{\Delta b} \approx \frac{\partial \tilde{k}_1}{\partial b}(x, b) = x \tilde{k}_3 \quad (3.14)$$

$$\frac{\Delta k_2}{\Delta b} \approx \frac{\partial \tilde{k}_2}{\partial b}(x, b) = - \frac{x}{x-1} \tilde{k}_3 \xrightarrow{x \gg 1} -k_3 \quad (3.15)$$

$$\frac{\Delta k_3}{\Delta b} \approx \frac{\partial \tilde{k}_3}{\partial b}(x, b) = \frac{1}{x-b} \tilde{k}_3, \quad (3.16)$$

mit $\tilde{k}_i = k_i/k_4$.

Für die Bifurkationslinien in Abb. 3.4 bedeutet dies also, dass der Parameterwert \tilde{k}_1 , an dem sich ein Fixpunkt befindet, proportional zu $x \Delta b$ anwächst. Für höhere Werte von x wächst die Kurve also schneller mit b an als für kleinere Werte, sodass die Kurven mit zunehmendem Schubgrößenparameter b verzerrt werden. Im Gegensatz dazu ist die Änderung des Parameterwerts \tilde{k}_2 für $x \gg 1$ unabhängig von x , sodass die einzelnen Bifurkationslinien zwar verschoben, jedoch nicht verzerrt werden. Zudem deutet das negative Vorzeichen an,

dass sich die Bifurkationslinien zu niedrigeren Werten von \tilde{k}_2 verschieben werden. Für \tilde{k}_3 wiederum wird die Verschiebung für $x = b$ maximal, sodass sich erneut eine Verzerrung der Bifurkationslinien einstellt, die für ausreichend große b sogar zu einer Bimodalität führt.

3.4 Fazit

Wir haben mit dem Konvektionsfeld $\alpha(x)$ eine simple Kenngröße gefunden, mit deren Hilfe sich eindimensionale stochastische Systeme charakterisieren lassen. Durch eine einfache Nullstellenberechnung lassen sich Maxima und Minima der stationären Fokker-Planck-Gleichung bestimmen. Auch die Analyse stochastischer p -Bifurkationen wird auf eine simple deterministische Bifurkationsanalyse abgebildet.

Am Beispiel des Schlögl-Modells haben wir gesehen, wie sich die Effekte intrinsischen Rauschens mithilfe des Konvektionsfelds sehr systematisch untersuchen lassen, während eine vergleichbare Analyse anhand numerischer Methoden deutlich aufwendiger gewesen wäre. Hierbei konnten wir sowohl das Verschwinden eines deterministisch stabilen Fixpunkts aufgrund des Rauschens, als auch eine rauschinduzierte Bistabilität beobachten. Die erzielten Ergebnisse standen stets im Einklang mit den Resultaten der zugrunde liegenden Mastergleichung, was sich anhand von Gillespie-Simulationen belegen ließ.

Hierbei ist besonders beachtlich, dass das Konvektionsfeld trotz seiner mathematischen Einfachheit sehr gute Ergebnisse liefert, während die deterministische Drift $f(x)$ den Einfluss des schubhaften intrinsischen Rauschens überhaupt nicht berücksichtigt und somit zur Untersuchung solcher Modelle ungeeignet ist.

4 Erweiterung auf zweidimensionale Systeme

Während die Anwendung des Konvektionsfelds zur Untersuchung eindimensionaler stochastischer Systeme bereits recht vielversprechende Ergebnisse liefert – wie wir unter anderem am Beispiel des Schlögl-Modells mit schubhaftem Rauschen gesehen haben – bleibt nun die Frage zu klären, inwieweit sich $\alpha(x)$ auch auf multivariate stochastische Systeme anwenden lässt, bei denen die Dynamik von mehr als einer chemischen Spezies betrachtet werden soll.

Hierzu erweitern wir zunächst in Abschnitt 4.1 unsere bisherige Definition von α auf mehrere Dimensionen. Hierbei stellt sich jedoch heraus, dass die Fixpunkte dieses Vektorfeldes nun nicht mehr für alle Systeme mit den Extrema von p_s zusammenfallen, sondern nur dann, wenn die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s des Systems verschwindet.

Wir leiten daher in Abschnitt 4.2 ein einfaches Kriterium her, anhand dessen wir ohne Lösen der Fokker-Planck-Gleichung überprüfen können, ob $\vec{j}_s \equiv 0$ ist. Beim anschließenden Versuch der Konstruktion eines Beispielsystems mit $\vec{j}_s \equiv 0$ in Abschnitt 4.3 zeigt sich jedoch, dass praktisch alle gekoppelten Systeme solche stationären Wahrscheinlichkeitsströme aufweisen, sodass eine Vorhersage der p_s -Extrema anhand des mehrdimensionalen Konvektionsfelds dort zunächst nicht möglich ist.

Wir beschränken uns daher auf die Betrachtung von $\vec{\alpha}$ -Fixpunkten, an denen lokal $\vec{j}_s = 0$ gilt, sodass eine Anwendung des Konvektionsfelds zumindest an deren Orten möglich ist. Wir bezeichnen diese Fixpunkte als präferierte bzw. gemiedene Zustände des Systems. Es folgt eine kurze Diskussion über die verschiedenen Arten von $\vec{\alpha}$ -Fixpunkten, die keine präferierten bzw. gemiedenen Zustände darstellen, an denen also $\vec{j}_s \neq 0$ ist.

Trotz der Anwendbarkeit des Konvektionsfelds an Orten mit $\vec{j}_s = 0$, lässt sich bislang nur durch Lösen der Fokker-Planck-Gleichung herausfinden, ob ein gegebener $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt einen solchen präferierten Zustand darstellt. Wir konstruieren daher in Abschnitt 4.6 eine Näherung von \vec{j}_s für große Systemgrößen, die uns erlaubt, Orte mit $\vec{j}_s = 0$ zu identifizieren. Hierbei stellt sich heraus, dass im Rahmen dieser Näherung an allen $\vec{\alpha}$ -Fixpunkten des Systems auch $\vec{j}_s = 0$ gilt. Alle $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte, die keine präferierten oder gemiedenen Zustände darstellen, müssen also an Orten liegen, an denen die Näherung für große N zusammenbricht. Wir entwickeln daher in Abschnitt 4.7 eine Methode, mit der sich die Güte dieser Näherung abschätzen lässt, sodass wir schließlich jene Orte identifizieren können, an denen eine Vorhersage der p_s -Extrema anhand des mehrdimensionalen Konvektionsfelds nicht möglich ist.

Mithilfe dieser Ergebnisse können wir in Abschnitt 4.8 das Konzept der mehrdimensionalen Phasenportraits einführen, welches eine sehr elegante Untersuchung zweidimensionaler stochastischer Systeme ermöglicht. Anschließend folgen mehrere Beispiele, um die Nützlichkeit der zuvor entwickelten Methoden zu demonstrieren.

Ein Großteil der Ergebnisse dieses Kapitels wurde in [53] bzw. [54] publiziert.

4.1 Das mehrdimensionale Konvektionsfeld

Zur Herleitung des mehrdimensionalen Konvektionsfelds ziehen wir zunächst die Wahrscheinlichkeitsstromdichte der Fokker-Planck-Gleichung (2.28) wie folgt auseinander:

$$\vec{j} = \vec{f}(\vec{x}) \cdot p(\vec{x}, t) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} [D_{ij}(\vec{x}) p(\vec{x}, t)] \vec{e}_i \quad (4.1)$$

$$= \left(\vec{f}(\vec{x}) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(\vec{x}) \vec{e}_i \right) \cdot p(\vec{x}, t) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} D_{ij}(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial x_j} p(\vec{x}, t) \vec{e}_i \quad (4.2)$$

$$= \vec{\alpha}(\vec{x}) \cdot p(\vec{x}, t) - \frac{1}{2N} \mathbf{D} \vec{\nabla} p(\vec{x}, t), \quad (4.3)$$

wobei wir mit

$$\vec{\alpha} = \vec{f}(\vec{x}) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(\vec{x}) \vec{e}_i \quad (4.4)$$

eine mehrdimensionale Formulierung des Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$ gefunden haben. Dass diese Größe für eindimensionale Systeme mit unserer bisherigen Definition (2.32) übereinstimmt, ist sofort einzusehen.

Während für diese Systeme jedoch aufgrund der Randbedingungen ein Verschwinden von j' mit $j \equiv 0$ identisch war, ist dies in mehrdimensionalen Systemen im Allgemeinen nicht mehr der Fall. Aus der Stationaritätsbedingung (2.30) lässt sich somit nun nicht mehr so einfach ableiten, dass Nullstellen von $\vec{\alpha}$ und Extrema der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte $p_s(\vec{x})$ übereinstimmen.

Stattdessen müssen wir nun zwei Arten von Systemen unterscheiden: Systeme, bei denen die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s verschwindet und solche, bei denen \vec{j}_s lediglich divergenzfrei, jedoch nicht null ist. Eine einfache Möglichkeit, Systeme mit $\vec{j}_s = 0$ zu erzeugen, besteht darin, mehrere ungekoppelte, eindimensionale Systeme in einem gemeinsamen Modell zu beschreiben. Dies ist allerdings von geringem Nutzen. Führt man bei einem solchen System nämlich eine beliebige Kopplungsreaktion hinzu, so ergibt sich in praktisch allen erdenklichen Fällen ein $\vec{j}_s \neq 0$, wie wir in Abschnitt 4.3 sehen werden. Wir wollen uns daher zunächst mit der Frage beschäftigen, welche Voraussetzungen ein stochastisches System erfüllen muss, damit die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s verschwindet.

Da Systeme mit mehr als zwei Spezies bereits in ihrer deterministischen Beschreibung eine extrem hohe Komplexität aufweisen können, da unter anderem von der intuitiven Darstellung durch Phasenportraits zu den weitaus weniger anschaulichen Poincaré-Schnitten gewechselt werden muss und weitere Phänomene wie beispielsweise Chaos auftreten können, wollen wir uns weiterhin nur auf zweidimensionale Systeme beschränken.

4.2 Voraussetzungen für $\vec{j}_s \equiv 0$

Um herzuleiten, unter welchen Bedingungen die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s verschwindet, nutzen wir deren Definition (4.3) und setzen sie null. Einfaches Umformen liefert dann

$$\mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = \vec{\nabla}\phi_s, \quad (4.5)$$

mit der Potentialfunktion $\phi = \frac{1}{2N} \ln(p_s)$. Es folgt, dass

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0 \quad (4.6)$$

gelten muss. Somit haben wir eine notwendige Bedingung für $\vec{j}_s \equiv 0$ gefunden. Dass diese Bedingung ebenso hinreichend ist, zeigt die folgende Überlegung:

Aus (4.6) folgt

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0 \quad (4.7)$$

$$\Rightarrow \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = \vec{\nabla}\psi, \quad (4.8)$$

mit einer beliebigen Potentialfunktion ψ .

Nun ist jedoch nicht automatisch gesichert, dass ψ mit unserem Potential $\phi = \frac{1}{2N} \ln(p_s)$ identisch ist, das sich aus der Lösung der zu \mathbf{D} und $\vec{\alpha}$ gehörigen Fokker-Planck-Gleichung ergibt.

Aus diesem Grund können wir die obige Rechnung nicht einfach so umkehren. Stattdessen bemerken wir, dass sich jede beliebige Funktion ψ als Superposition des Fokker-Planck-Potentials ϕ plus einem Korrekturterm δ schreiben lässt (Der Einfachheit halber haben wir hier $2N = 1$ gesetzt):

$$\begin{aligned} \psi &= \phi + \delta \\ &=: \ln p_s + \ln q. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Für $q = 1$, (d.h. $\delta = 0$) erhalten wir das Fokker-Planck-Potential ϕ . Für $q \neq 1$ ergeben sich andere Potentialfunktionen, die (4.8) ebenfalls erfüllen.

Die Existenz dieser alternativen Potentialfunktionen ψ könnte bedeuten, dass sich ein System mit nicht-verschwindendem stationären Wahrscheinlichkeitsstrom \vec{j}_s finden lässt, obwohl $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0$ ist.

Glücklicherweise lassen sich jedoch solche alternativen Potentialfunktionen ausschließen. Hierzu setzen wir die Definition (4.9) in (4.8) ein und vereinfachen

$$\vec{\alpha}p_s q - \mathbf{D}\vec{\nabla}(p_s q) = 0. \quad (4.10)$$

Nimmt man nun den Gradienten dieser Gleichung und nutzt die Abkürzung $\rho := p_s \cdot q$ ergibt sich

$$0 = -\vec{\nabla} \left(\vec{\alpha}\rho - \mathbf{D}\vec{\nabla}\rho \right). \quad (4.11)$$

was der stationären Fokker-Planck-Gleichung des Systems entspricht. Da die Lösung ρ dieser Gleichung eindeutig ist [55], muss $\rho = p_s$ gelten. Somit ist $q = 1$ und $\psi = \phi$ die einzige

Potentialfunktion, die die Fokker-Planck-Gleichung erlaubt. Wir können also folgern, dass (4.8) hinreichend für ein Verschwinden der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist:

$$\vec{j}_s \equiv 0 \Leftrightarrow \vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} \equiv 0 . \quad (4.12)$$

Diese Relation wird auch Integrabilitätsbedingung genannt.

In vielen Standardwerken zur Fokker-Planck-Gleichung und stochastischen Systemen wird die Bedingung $\vec{j}_s \equiv 0$ zudem mit detailliertem Gleichgewicht in der Master-Gleichung assoziiert [20]. Dies gilt jedoch nur unter gewissen Einschränkungen. Tatsächlich handelt es sich nämlich bei der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s der Fokker-Planck-Gleichung lediglich um eine Näherung des vollen stationären Wahrscheinlichkeitsstroms der Master-Gleichung, welche aus der in zweiter Ordnung abgebrochenen Kramers-Moyal-Entwicklung hervorgeht. Wie Ceccato und Frezzato [56] gezeigt haben, existieren Systeme, bei denen die Mastergleichung ein detailliertes Gleichgewicht aufweist, jedoch in der Fokker-Planck-Gleichung $\vec{j} \neq 0$ ist. Umgekehrt ist es ebenfalls möglich Systeme zu konstruieren, bei denen $\vec{j}_s \equiv 0$ ist, in der Mastergleichung aber dennoch kein detailliertes Gleichgewicht vorherrscht, wie beispielsweise:

$$\begin{aligned} \emptyset &\xrightarrow{a} X \\ 2X &\xrightarrow{b} \emptyset . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Da es sich um ein eindimensionales System handelt muss $\vec{j}_s \equiv 0$ gelten. Gleichzeitig kann aber detailliertes Gleichgewicht in der Mastergleichung anhand von Kolmogorovs Kriterium ausgeschlossen werden. Dieses besagt, dass sich eine zeitkontinuierliche Markovkette genau dann im detaillierten Gleichgewicht befindet, wenn ihre Übergangsraten

$$\mu(i_1|i_2)\mu(i_2|i_3)\dots\mu(i_{n-1}|i_n)\mu(i_n|i_1) = \mu(i_1|i_n)\mu(i_n|i_{n-1})\dots\mu(i_3|i_2)\mu(i_2|i_1) \quad (4.14)$$

für alle Zustandsfolgen

$$i_1, i_2, \dots, i_n \quad (4.15)$$

erfüllen [57]. Anschaulich gesprochen muss also das Produkt der Propensitäten bei allen möglichen Zyklen des Systems in Vor- und Rückrichtung das gleiche sein.

Die Übergangsraten von (4.13) lauten jedoch

$$\mu(i|j) = \delta_{j,i-1}a + \delta_{j,i+2}(i+2)(i+1)b \quad (4.16)$$

sodass sich beispielsweise bei der Zustandsfolge (0, 1, 2, 0) ein Produkt von

$$\mu(0|2)\mu(2|1)\mu(1|0) = 2 \cdot 1 \cdot b \cdot a \cdot a \quad (4.17)$$

ergibt, in Rückrichtung jedoch

$$\mu(0|1)\mu(1|2)\mu(2|0) = 0 . \quad (4.18)$$

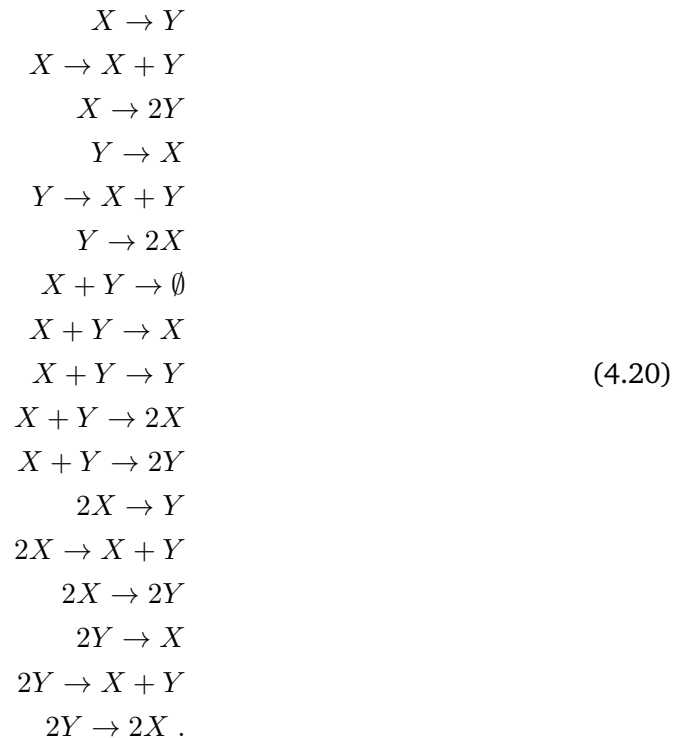
4.3 Kopplungsterme induzieren stationäre Wahrscheinlichkeitsströme

Die einfachste Idee zur Konstruktion eines gekoppelten, zweidimensionalen Beispielsystems mit $\vec{j}_s \equiv 0$ besteht sicherlich darin, mit zwei ungekoppelten Spezies mit möglichst einfacher Dynamik zu starten und diese mit geeigneten Kopplungsreaktionen so zu verbinden, dass ein gekoppeltes, zweidimensionales System entsteht. Hierbei muss darauf geachtet werden, dass auch nach Einführen dieser Kopplungsreaktion(en) die Integrabilitätsbedingung (4.12) erfüllt bleibt.

Die einfachste Möglichkeit für das ungekoppelte Basissystem stellt sicherlich ein Geburts-Sterbe-Prozess für beide Spezies dar:



Erlaubt man maximal zwei Teilchen als Produkt und Edukt einer Kopplungsreaktion, ergeben sich 17 verschiedene mögliche Kopplungsreaktionen:



Diese müssen nun mit dem ursprünglichen Reaktionssystem (4.19) so kombiniert werden, dass die Integrabilitätsbedingung des Gesamtsystems erfüllt ist. Dies ist jedoch praktisch nicht

zu erreichen. Berechnungen mithilfe des Computer-Algebra-Systems *Mathematica* zeigen, dass sich bei Hinzunahme einer einzelnen Kopplungsreaktion aus (4.20) in keinem einzigen Fall ein Parametersatz finden lässt, der die Integrabilitätsbedingung erfüllt, zumindest solange die Reaktionskonstanten positiv gewählt werden. All diese Varianten führen also zu nicht-verschwindenden stationären Wahrscheinlichkeitsströmen.

Da eine Erweiterung dieser Rechnung auf zwei oder mehr Kopplungsreaktionen enorme Rechenzeit benötigt, wollen wir diese hier nicht weiter verfolgen. Natürlich sind auch andere Grundgleichungen als (4.19) denkbar, die womöglich eher zum Erfolg führen. Auch hier wurden einige weitere Alternativen in *Mathematica* überprüft, jedoch alle ohne Erfolg.

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass in der Regel bereits eine einzelne Kopplungsreaktion ausreicht, um im gekoppelten System stationäre Wahrscheinlichkeitsströme zu induzieren, die unabhängig von der jeweiligen Parameterwahl auftreten. Die Suche nach gekoppelten Systemen mit $\vec{j}_s = 0$ gestaltete sich deutlich schwieriger als zunächst erwartet und im Rahmen dieser Arbeit konnte kein einziges solches System mit physikalisch wünschenswerten Eigenschaften – wie zum Beispiel dem Vorhandensein eines stabilen, positiven Fixpunkts – identifiziert werden. Es ist daher sinnvoll, davon auszugehen, dass im Allgemeinen jedes gekoppelte zweidimensionale Reaktionssystem auch stationäre Wahrscheinlichkeitsströme $\vec{j}_s \neq 0$ aufweist.

Da in solchen Systemen die Extrema der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte im Allgemeinen nicht mehr mit den Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ übereinstimmen, ist eine Anwendung des Konvektionsfeldes nicht ohne weiteres möglich. Dennoch lassen sich auch hier oftmals spezielle Fixpunkte \vec{x}_0 von $\vec{\alpha}$ finden, an denen lokal $\vec{j}_s(\vec{x}_0) = 0$ ist und eine Übereinstimmung mit einem p_s -Extremum somit noch immer gegeben ist. Wir wollen diese Fixpunkte im folgenden Abschnitt genauer analysieren.

4.4 Präferierte Zustände

Verschwimmt die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s am Ort \vec{x}_0 eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts, gilt

$$0 = \vec{j}_s(\vec{x}_0) = \underbrace{\vec{\alpha}(\vec{x}_0)}_{0, \text{ da Fixpunkt}} \cdot p_s(\vec{x}_0) - \frac{1}{2N} \mathbf{D}(\vec{x}_0) \vec{\nabla} p_s(\vec{x}_0) \quad (4.21)$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} p_s(\vec{x}_0) = 0, \quad (4.22)$$

es bildet sich also ein Extremum in p_s . Wir nennen diese Fixpunkte ab sofort *präferierte Zustände* bzw. – im Fall von Wahrscheinlichkeitsminima – *gemiedene Zustände*.

4.4.1 Stabilität des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts bestimmt Art des p_s -Extremums

Analog zur Rechnung im eindimensionalen Fall lässt sich auch hier wieder zeigen, dass stabile $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte Wahrscheinlichkeitsmaxima, instabile Fixpunkte Wahrscheinlichkeitsminima entsprechen. Hierzu setzen wir (4.3) gleich null und leiten nach der beliebigen Koordinate x_m ab:

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_m} p + \alpha_i \frac{\partial p}{\partial x_m} = \frac{1}{2N} \sum_k \left(\frac{\partial D_{ik}}{\partial x_m} \frac{\partial p}{\partial x_k} + D_{ik} \frac{\partial^2 p}{\partial x_k \partial x_m} \right). \quad (4.23)$$

Am Ort eines Wahrscheinlichkeitsextremums gilt $\frac{\partial p}{\partial x_m} = \frac{\partial p}{\partial x_k} = 0$ und wir erhalten

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_m} p = \frac{1}{2N} \sum_j D_{ij} \frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_m}. \quad (4.24)$$

Dies lässt sich als Matrixgleichung schreiben:

$$\mathbf{h} = 2Np \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{J}_s, \quad (4.25)$$

mit der Jacobimatrix $(\mathbf{J}_s)_{ik} = \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_k}$ und der Hessematrix $(\mathbf{h})_{ik} = \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_k}$.

Da die Diffusionsmatrix \mathbf{D} positiv definit ist, ist es auch ihre Inverse. Multiplikation mit einer positiv definiten Matrix ändert allerdings nichts an der Definitheit von \mathbf{J} , genau so wenig wie die Multiplikation mit der positiven Funktion p . Aus diesem Grund weisen die Hessematrix von p_s und die Jacobimatrix von $\vec{\alpha}$ stets die gleiche Definitheit auf, sodass stabile $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte mit präferierten Zuständen, instabile Fixpunkte des Konvektionsfelds mit gemiedenen Zuständen einhergehen.

4.5 Fixpunkte mit $\vec{j} \neq 0$

Da in zweidimensionalen, gekoppelten Systemen in der Regel nicht alle Fixpunkte des Konvektionsfelds präferierte bzw. gemiedene Zustände darstellen, stellt sich die Frage wie mit $\vec{\alpha}$ -Fixpunkten mit $\vec{j}_s \neq 0$ umzugehen ist, denen zunächst kein p_s -Extremum zugeordnet werden kann. Umgekehrt können sich in solchen Systeme auch p_s -Extrema ausbilden, die nicht am Ort eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts liegen.

Ein besonders anschauliches Beispiel hierfür stellen *langsame transiente Zustände* dar. Sie entstehen in Systemen, bei denen ein Grenzzyklus mit nicht-konstanter Geschwindigkeit durchlaufen wird, wie in Abb. 4.1 dargestellt: Während die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte p_s einen Krater ausbildet, dessen Rand mit dem Verlauf des Grenzzyklus übereinstimmt, werden entlang dieses Randes, an Orten, die das System besonders langsam durchläuft, Wahrscheinlichkeitsmaxima; an Orten, die das System besonders schnell durchläuft, Sattel entstehen. Da dort jedoch weiterhin $\vec{j}_s \neq 0$ gilt, handelt es sich nicht um präferierte oder gemiedene Zustände des Systems und diese Extrema werden nicht als α -Fixpunkte erfasst.

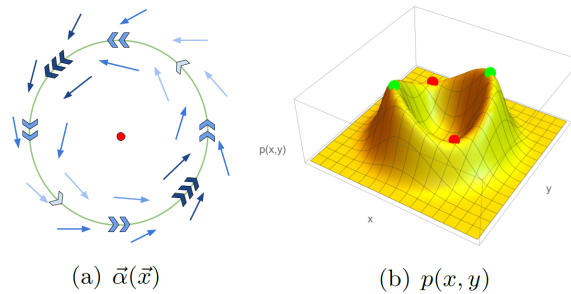


Abbildung 4.1 Schematische Darstellung des Konvektionsfeldes $\vec{\alpha}$ und der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s für ein System mit einem Grenzzyklus mit nicht-konstanter Geschwindigkeit. Orte auf dem Grenzzyklus mit schnellerer Dynamik (angedeutet durch mehr und dunklere Vektorpfeile in (a)) führen zu Sattelpunkten in p_s (rote Punkte in (b)). An Orten mit langsamerer Dynamik (hellere und weniger Pfeile in (a)) bilden sich Wahrscheinlichkeitsmaxima aus (grüne Punkte in (b)). Diese Maxima stellen langsame transiente Zustände dar.

Ein weiteres interessantes Phänomen stellen Dipolströme dar, bei denen zwar einem $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt weiterhin ein Maximum von p_s zugeordnet werden kann, beide Punkte jedoch nicht mehr exakt zusammenfallen, sondern an leicht versetzten Orten liegen, an denen jeweils $\vec{j}_s \neq 0$ gilt. Wir werden sie in Abschnitt 5.4 noch in aller Ausführlichkeit diskutieren.

Grundsätzlich sind auch echte „false positives“ denkbar, bei denen das Konvektionsfeld einen Fixpunkt vorhersagt, diesem jedoch keinerlei p_s -Extremum zugeordnet ist. Trotz umfangreicher Tests sind im Rahmen dieser Arbeit jedoch keine solchen Fixpunkte aufgetreten.

Die folgende Tabelle fasst noch einmal alle möglichen Kombinationen von $\vec{\alpha}$, \vec{j}_s und p_s und die zugehörigen Phänomene zusammen:

$= 0$	$\neq 0$	Topologie
$\vec{\alpha}, \vec{j}, \nabla p$	-	Präferierter/gemiedener Zustand
$\vec{\nabla} p$	$\vec{j}, \vec{\alpha}$	Langsamer transienter Zustand / Dipol
$\vec{\alpha}$	$\vec{j}, \nabla p$	„False Positive“ / Dipol
\vec{j}	$\vec{\alpha}, \nabla p$	Symmetriepunkt / Dipol

4.6 Näherungen der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte für große N

Bisher haben wir festgestellt, dass praktisch alle interessanten mehrdimensionalen Reaktionssysteme stationäre Wahrscheinlichkeitsströme aufweisen. Obwohl das Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$ auch für solche Systeme von Nutzen sein kann, lassen sich dort lediglich für präferierte bzw. gemiedene Zustände, bei denen $\vec{j}_s = 0$ ist, klare Aussagen bezüglich der Extrema der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s treffen. Mögliche andere Fixpunkte von $\vec{\alpha}$, an denen $\vec{j}_s \neq 0$ ist, stellen allerdings keine p_s -Extrema dar. Zudem werden nicht alle p_s -Extrema als $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte erfasst, wie beispielsweise im Falle der langsamen transienten Zustände.

Dieses Problem wird zudem noch dadurch verkompliziert, dass sich auch präferierte Zustände nicht allein anhand von $\vec{\alpha}$ identifizieren lassen, sondern immer auch \vec{j}_s am Ort eines α -Fixpunkts bekannt sein muss. Dies setzt aber in der Regel das Lösen der Fokker-Planck-Gleichung voraus, was die Vorhersagemethode anhand des Konvektionsfeldes ohnehin überflüssig machen würde.

Aus diesem Grund wollen wir uns nun mit der Frage befassen, wie sich \vec{j}_s in der Nähe eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunktes anhand des Konvektionsfeldes, jedoch ohne ein Lösen der Fokker-Planck-Gleichung abschätzen lässt.

Hierzu gehen wir zunächst von sehr großen Systeme mit $N \gg 1$ aus. Laut (4.4) weicht $\vec{\alpha}$ hier nur wenig von der deterministischen Drift \vec{f} ab. Weiterhin wird die momentane Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}(\vec{x}, t)$ zu jedem Zeitpunkt nur wenig von ihrer deterministischen Form abweichen, bei der aller Wahrscheinlichkeitsstrom in die Attraktoren von \vec{f} fließt. Insbesondere müssen also für ausreichend große N die Fixpunkte von \vec{j}_s und die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ sehr eng beieinander liegen. Wir nehmen daher im Folgenden eine Entwicklung in führender Ordnung in $1/N$ vor, um einen analytischen Ausdruck für die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s zu erhalten, die nur von den Größen $\vec{\alpha}$ und \mathbf{D} abhängt.

Hierzu spalten wir das Konvektionsfeld in zwei Komponenten auf:

$$\vec{\alpha} = \mathbf{D} \cdot \vec{\alpha}_{\parallel} + \vec{\alpha}_{\perp} \quad (4.26)$$

mit

$$\vec{\alpha}_{\perp} \perp \vec{\alpha}_{\parallel} \quad (4.27)$$

und

$$\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}_{\parallel} = 0. \quad (4.28)$$

Für den Fall, dass \mathbf{D} proportional zur Einheitsmatrix ist, lässt sich die Zerlegung in $\vec{\alpha}_{\parallel}$ und $\vec{\alpha}_{\perp}$ auf einfache Weise im Fourierraum lösen, indem gefordert wird, dass die Bedingungen (4.27) and (4.28) für jede Fourierkomponente $\vec{\alpha}_{\vec{k}}$ einzeln erfüllt werden. Dies liefert:

$$\vec{k} \times \vec{\alpha}_{\parallel \vec{k}} = 0. \quad (4.29)$$

Hierdurch wird die Ebene festgelegt in der $\vec{\alpha}_{\parallel \vec{k}}$ liegen muss, woraus sich die Zerlegung $\vec{\alpha}_{\vec{k}} = \vec{\alpha}_{\perp \vec{k}} + \vec{\alpha}_{\parallel \vec{k}}$ in die beiden senkrechten Komponenten ergibt.

Für den Fall allgemeiner \mathbf{D} lässt sich diese Rechnung allerdings nicht mehr so einfach durchführen. Stattdessen muss eine partielle Differentialgleichung gelöst werden, die äquivalent zur Fokker-Planck-Gleichung ist. Glücklicherweise ist jedoch eine solche explizite Konstruktion der $\vec{\alpha}$ -Zerlegung für die folgenden Überlegungen nicht notwendig.

Stattdessen lassen sich anhand von (4.26) explizite Ausdrücke für die Größen p_s und \vec{j}_s berechnen. Hierzu betrachten wir zunächst einen Spezialfall bei dem $\vec{\alpha}_\perp = 0$ ist. In diesem Fall ergeben die Relationen (4.28) und (4.12), dass \vec{j}_s verschwindet. Die Definition (4.3) liefert dann sofort die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_s \equiv p_s^\parallel = A e^{2N \int \vec{\alpha}_\parallel d\vec{x}}, \quad (4.30)$$

wodurch

$$\vec{\nabla} p_s^\parallel = 2N \vec{\alpha}_\parallel \cdot p_s^\parallel \quad (4.31)$$

gilt. Wenig überraschend wird die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte also mit zunehmender Systemgröße N enger und steiler und das Verhältnis zwischen $\vec{\nabla} p$ und p ist proportional zu N . Die N -Abhängigkeit der beiden Beiträge zu \vec{j} ist daher von der selben Ordnung,

$$\vec{j} = \underbrace{\vec{\alpha} p}_{\sim p} - \underbrace{\frac{1}{2N} \mathbf{D} \vec{\nabla} p}_{\sim p}, \quad (4.32)$$

während sich die Terme in der Divergenz von \vec{j} in ihrer N -Abhängigkeit teilweise unterscheiden:

$$0 \stackrel{!}{=} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \underbrace{\vec{\nabla} \vec{\alpha} \cdot p}_{\sim p} + \underbrace{\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} p}_{\sim Np} - \underbrace{\frac{1}{2N} \vec{\nabla} (\mathbf{D} \vec{\nabla} p)}_{\sim Np}. \quad (4.33)$$

In führender Ordnung in $1/N$ können wir daher den ersten Term vernachlässigen. Wendet man zudem die Zerlegung (4.26) an, ergibt sich

$$0 = \vec{\alpha}_\perp \cdot \vec{\nabla} p + \mathbf{D} \vec{\alpha}_\parallel \cdot \vec{\nabla} p + \frac{1}{2N} \vec{\nabla} (\mathbf{D} \vec{\nabla} p). \quad (4.34)$$

Die Lösung dieser partiellen Differentialgleichung ist in führender Ordnung in $1/N$ immer noch durch (4.30) gegeben, wie man leicht durch Einsetzen von (4.30) in (4.34) sehen kann:

$$0 = 2N p_s^\parallel \cdot \underbrace{\vec{\alpha}_\perp \cdot \vec{\alpha}_\parallel}_0 + \underbrace{\vec{\nabla} (\vec{\alpha}_\parallel p_s^\parallel - \frac{1}{2N} \mathbf{D} \vec{\nabla} p_s^\parallel)}_0. \quad (4.35)$$

Das bedeutet, dass $\vec{\alpha}_\perp$ in führender Ordnung in $1/N$ keinen Einfluss auf p_s hat. Wir erhalten nun durch Einsetzen von (4.26) und (4.31) in (4.32)

$$\vec{j}_s = \vec{\alpha}_\perp p_s \quad (4.36)$$

als Näherung für \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$.

Dies hat mehrere interessante Konsequenzen: Zunächst einmal steht \vec{j}_s aufgrund von (4.27) und (4.31) immer senkrecht auf $\vec{\nabla} p_s$. Somit folgt \vec{j}_s den Höhenlinien von p_s . Dies bedeutet aber auch, dass \vec{j}_s am Ort eines Maximums oder Minimums von p_s einen Fixpunkt

aufweisen muss, falls es nicht gänzlich verschwindet. Somit liegen in dieser Näherung alle Maxima und Minima von p_s am Ort eines \vec{j}_s -Fixpunkts. Das gleiche Argument gilt natürlich ebenso für Sattelpunkte von \vec{j}_s und p_s .

Aufgrund von (4.3) führt diese Korrespondenz zwischen \vec{j}_s -Fixpunkten und p_s -Extrema außerdem dazu, dass auch das Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$ Fixpunkte am selben Ort aufweisen muss. Für große N gilt somit

$$\vec{j}_s(\vec{x}_0) = 0 \Leftrightarrow \vec{\alpha}(\vec{x}_0) = 0 \Leftrightarrow \vec{\nabla} p = 0. \quad (4.37)$$

Das heißt, solange N ausreichend groß ist, handelt es sich bei allen Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ um präferierte bzw. gemiedene Zustände. Dipole, langsame transiente Zustände und falsch-positive Fixpunkte können hingegen in führender Ordnung in $1/N$ nicht auftreten. Um diese Überlegung abzuschließen, wollen wir nun noch diskutieren, wie groß N für einen konkreten $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt tatsächlich sein muss, damit zumindest näherungsweise ein präferierter bzw. gemiedener Zustand vorliegt.

4.7 Grenzen der \vec{j}_s -Näherung

Um das mehrdimensionale Konvektionsfeld sinnvoll zur Untersuchung stochastischer Reaktionsnetzwerke mit $\vec{j}_s \neq 0$ nutzen zu können, ist es unerlässlich ein Kriterium dafür zu finden, wann ein System ausreichend groß ist, sodass davon ausgegangen werden kann dass ein gegebener Fixpunkt \vec{x}_0 in $\vec{\alpha}$ auch tatsächlich einen bevorzugten bzw. gemiedenen Zustand darstellt. In diesem Abschnitt wollen wir ein solches Kriterium entwickeln, wobei wir von einer einfachen anschaulichen Argumentation ausgehen, die jedoch keinen Anspruch auf vollständige mathematische Exaktheit besitzt.

Wir starten hierzu mit folgender Überlegung: Die $1/N$ -Entwicklung des vorherigen Abschnitts kann nur dann gute Ergebnisse liefern, wenn der führende Term (4.36) groß ist gegenüber dem nächst höheren Term, den wir vernachlässigt haben. Insbesondere bricht die Näherung zusammen, wenn in der Umgebung $U(\vec{x}_0)$ eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts der führende Term verschwindet, obwohl dort $\vec{j}_s(\vec{x}) \neq 0$ ist. In diesem Fall lässt sich schreiben:

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}_\perp(\vec{x}) &= 0 \\ \Rightarrow \vec{\alpha}(\vec{x}) &= \mathbf{D}\vec{\alpha}_\parallel(\vec{x}) \\ \Rightarrow \vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha}(\vec{x}) &= 0, \end{aligned} \quad (4.38)$$

für $\vec{x} \in U(\vec{x}_0)$. Hierbei haben wir (4.26) und (4.28) genutzt.

Hieraus lässt sich folgern, dass die Näherung von \vec{j}_s (und damit die Vorhersage der p_s -Extrema) umso schlechter wird, je näher sich der betrachtete $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt an der durch $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0$ definierten Kurve befindet. Der Abstand von dieser Kurve, der benötigt wird, um eine bestimmte Güte der j_s -Näherung zu erhalten, hängt hierbei invers von der Systemgröße ab. Wir wollen nun eine einfache Abschätzung dieser Güte herleiten.

Hierzu ermitteln wir zunächst den Abstand $\delta = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$ des betrachteten $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts (x_0, y_0) zur $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0$ -Kurve. Dies wird beispielsweise durch Lösen des

folgenden Extremwertproblems mit Nebenbedingungen erreicht:

$$\frac{\partial}{\partial\{x,y,\lambda\}}(\delta + \lambda F(x,y)) = 0, \quad (4.39)$$

wobei die Nebenbedingung $F(x,y) := (\nabla \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha})_z = 0$ angibt, dass der Punkt (x,y) auf der Kurve liegen muss. Der so berechnete Punkt (x,y) ist derjenige Punkt auf der Kurve, der dem α -Fixpunkt \vec{x}_0 am nächsten liegt, wodurch sich der Abstand δ zwischen Kurve und Fixpunkt bestimmen lässt.

Um eine Vergleichsgröße zu diesem Abstand zu erhalten, nutzen wir die Linear-Noise-Näherung der Fokker-Planck-Gleichung (2.35) am Ort des α -Fixpunkts \vec{x}_0 , wodurch sich eine gaußförmige Näherung der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s um den Ort des Fixpunkts \vec{x}_0 ergibt. Die Breite dieser bivariaten Normalverteilung wird durch die Eigenwerte der Kovarianzmatrix Σ bestimmt. Der Einfachheit halber nutzen wir nur den größeren dieser beiden Eigenwerte als Vergleichsgröße und definieren das Verhältnis

$$\gamma = \frac{\max(\text{Eigenwerte}(\Sigma))}{\delta} \quad (4.40)$$

sowie die Größe

$$\Gamma = \frac{1}{1 + \gamma} \quad (4.41)$$

als ungefähres Maß für die Güte der \vec{j}_s -Näherung. Für eine gute Qualität der Näherung ist das Verhältnis $\gamma \ll 1$ und wird mit abnehmender Qualität der Näherung immer größer, da der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt in diesen Bereichen immer näher an die $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha}$ -Linie rückt, bei der die Näherung zusammenbricht und γ divergiert. Die Güte Γ wiederum ist so definiert, dass sie stets zwischen 0 und 1 liegt, wobei 1 für eine in diesem Sinne bestmögliche Qualität der Näherung steht und für $\Gamma = 0$ die \vec{j}_s -Näherung zusammenbricht.

Wir können also durch Auswerten der Größe Γ am Ort eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts bestimmen, inwiefern die \vec{j}_s -Näherung (4.36) dort zuverlässige Ergebnisse liefert. Ist $\Gamma \approx 1$, wissen wir, dass \vec{j}_s den Höhenlinien von p_s folgt und somit der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt näherungsweise mit einem \vec{j}_s -Fixpunkt sowie einem Extremum von p_s zusammenfällt. Fixpunkte des Konvektionsfeldes mit $\Gamma \approx 1$ stellen also in dieser Näherung präferierte bzw. gemiedene Zustände des Systems dar. Die Umkehrung ist aber nicht notwendigerweise korrekt: Wie wir in Abschnitt 5.4 sehen werden, weisen $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte mit $\Gamma \ll 1$ zwar in der Regel nicht-verschwindende stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichten mit Dipolcharakter auf, jedoch können auch diese Fixpunkte mit einem p_s -Extremum einhergehen, welches zwar nicht exakt am gleichen Ort, häufig jedoch in unmittelbarer Nähe des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts auftritt.

Zudem gilt die obige Rechnung nur in der Umgebung eines stabilen $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts, nicht jedoch in der Nähe eines Sattels oder instabilen Fixpunkts, da dort eine Näherung der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte als Gaußverteilung keinen Sinn ergibt. Auch der Zusammenbruch der $1/N$ -Näherung beim Entstehen langsamer transienter Zustände, den wir in Abschnitt 5.5.2 noch einmal im Detail untersuchen werden, wird in der obigen Gütedefinition nicht mit erfasst.

4.8 Stochastische Phasenportraits

Ziel der hier entwickelten Methoden ist es, eine einfachere Analyse stochastischer Systeme zu ermöglichen, bei der weitestgehend auf das Lösen von (partiellen) Differentialgleichungen verzichtet werden kann. Bislang haben wir gesehen, wie sich stochastische Reaktionssysteme anhand der Maxima und Minima der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s charakterisieren lassen, die an Orten mit $\Gamma \approx 1$ den stabilen bzw. instabilen Fixpunkten des Konvektionsfeldes $\vec{\alpha}$ entsprechen. Zudem kann das Konvektionsfeld für die Untersuchung stochastischer p -Bifurkationen genutzt werden, wie wir im eindimensionalen Fall bereits ausführlich am Beispiel des Schlögl-Modells gesehen haben. Diese Bifurkationsanalyse läuft völlig analog zum deterministischen Vorgehen ab, wobei lediglich die deterministische Drift $\vec{f}(\vec{x})$ durch das Konvektionsfeld $\vec{\alpha}(\vec{x})$ ersetzt werden muss.

In Anlehnung an dieses Vorgehen erscheint es naheliegend das dynamische System

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{\alpha}(\vec{x}) \quad (4.42)$$

näher zu untersuchen. Ein naiver Blick auf diese Gleichung kann leicht dazu verleiten anzunehmen, dass diese Gleichung die Zeitentwicklung der Maxima der Fokker-Planck-Gleichung beschreibt. Dies erscheint vor allem deshalb plausibel, weil die wichtigsten Grenzfälle erfüllt sind, nämlich zum einen $N \rightarrow \infty$, wo Maximum und Mittelwert von p übereinstimmen und (4.42) in die deterministische Bewegungsgleichung (2.39) übergeht und zum anderen $t \rightarrow \infty$, wo $\vec{\alpha}(\vec{x}) = 0$ auf die Maxima und Minima von p_s führt.

Diese naheliegende Annahme kann jedoch aus verschiedenen Gründen nicht zutreffend sein: Erstens gilt die deterministische Bewegungsgleichung (2.39) für den Mittelwert des stochastischen Systems, der zu jeder Zeit eindeutig definiert ist. Im Gegensatz dazu können aber in der Regel mehrere Maxima und Minima gleichzeitig existieren. Welches dieser Extrema (4.42) dann beschreiben würde, bleibt unklar. Zweitens lässt (4.42) als gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung nur eine einzelne Anfangsbedingung zu. Die zeitliche Entwicklung der Maxima und Minima eines stochastischen Systems hängt aber in der Regel von mehreren Faktoren, wie beispielsweise deren Lage, Breite sowie von der Nähe zu weiteren Extrema und somit im Allgemeinen von der gesamten Anfangsverteilung $p(x, 0)$ ab. Die fehlende Möglichkeit diese Anfangsverteilung in der Anfangsbedingung von (4.42) zu berücksichtigen ist somit ein weiteres Indiz dafür, dass diese Differentialgleichung nicht die korrekte Zeitentwicklung der Extrema des Systems angeben kann [58].

Dennoch kann das über (4.42) definierte dynamische System durchaus nützlich sein. Es erlaubt uns nämlich Phasenportraits des stochastischen Systems zu zeichnen. Wie wir bereits wissen, stehen stabile Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ für Maxima, instabile Fixpunkte für Minima der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte. Auch wenn der tatsächliche zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsstrom von den jeweiligen Anfangsbedingungen abhängt, geben die $\vec{\alpha}$ -Vektorpfeile an, in welche Richtung der momentane Wahrscheinlichkeitsstrom fließen würde, wenn man mit einer Gleichverteilung starten würde, wie man anhand der Definition (4.3) von \vec{j} sofort sehen kann.

Sogar die Trajektorien, die sich aus (4.42) ergeben, können nützlich sein. Mit ihrer Hilfe lassen sich stochastische Grenzzyklen identifizieren, die in der Regel mit kraterförmigen Wahrscheinlichkeitsdichten einhergehen, sowie ein grundsätzlicher Eindruck über die Richtung

des zeitabhängigen Wahrscheinlichkeitsstroms gewinnen. Da diese Trajektorien allerdings keinen realen Sample-Trajektorien des stochastischen Systems entsprechen, wollen wir sie als *Pseudo-Trajektorien* bezeichnen.

Schließlich lassen sich mithilfe der Nullklinen von (4.42) Randmaxima des Systems erfassen, bei denen $\vec{\nabla} p_s(\vec{x}) \neq 0$ ist und somit kein α -Fixpunkt vorliegt. Dieses Vorgehen wird in Abschnitt 4.10 noch ausführlich erläutert.

Wir wollen die anhand von (4.42) erstellten Phasenportraits ab sofort als *stochastische Phasenportraits* (SPPs) bezeichnen.

Obwohl mit dem Konzept der wahrscheinlichsten Phasenportraits von Cheng et al. [23] bereits ein recht ähnlicher Ansatz existiert, um Phasenportraits stochastischer Systeme zu zeichnen, sind diese in der Regel mit aufwendigen Monte-Carlo-Simulationen verbunden, während die mathematische Komplexität unseres Ansatzes eher mit der eines deterministischen Phasenportraits zu vergleichen ist.

Nachdem wir die Eigenschaften und die Anwendbarkeit des Konvektionsfeld in zwei Dimensionen ausführlich diskutiert haben, folgen nun einige Beispiele, bei denen die vorgestellten Techniken angewendet werden sollen. Hierbei starten wir zunächst mit einem einfachen Beispiel, das zwar zwei Spezies enthält, sich allerdings aufgrund einer Erhaltungsgröße auf ein eindimensionales System reduzieren lässt. Hierdurch stimmen Fixpunkte des Konvektionsfeldes und Extrema von p_s stets überein und die Ergebnisse unseres zweidimensionalen Formalismus lassen sich leicht anhand des reduzierten Systems überprüfen.

4.9 Nahrungssuche einer Ameisenkolonie

In [14] führen Biancalani et al. ein Modell ein, dass das Auftreten stochastischer Bistabilität am Beispiel der Nahrungssuche einer Kolonie von Ameisen zeigt, die aus zwei verschiedenen Futterquellen wählen können. Das Modell stellt aufgrund seiner Einfachheit sowie der Tatsache, dass sich die stochastische Dynamik signifikant von der deterministischen Dynamik unterscheidet, ein besonders interessantes Beispiel zur Demonstration der hier entwickelten Methoden dar.

4.9.1 Das Modell

Betrachtet wird eine Kolonie aus N Ameisen, denen zwei unterschiedliche Futterquellen zur Verfügung stehen. Die Ameisen, die an der ersten Futterquelle fressen, werden mit X_1 bezeichnet, die, die an der zweiten Quelle fressen, mit X_2 . Es sollen nun zwei verschiedene Arten von Reaktionen möglich sein: Rekrutierung von Individuen, die bisher an der anderen Futterquelle gefressen haben, mit der Rate r und zufälliger Wechsel eines Individuums zur anderen Futterquelle mit Rate ϵ :



Da die Gesamtzahl der Ameisen erhalten bleibt, lässt sich die Dynamik auch anhand einer einzelnen Variablen beschreiben, was wir hier allerdings zunächst nicht ausnutzen werden. Aufgrund dieses endlichen Zustandsraums ist zudem die zugrunde liegende Mastergleichung analytisch lösbar. Details hierzu finden sich in [14].

Die Stöchiometrische Matrix und der Propensitätsvektor dieses Systems lauten

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.44}$$

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} rx_1x_2 \\ rx_1x_2 \\ \epsilon x_1 \\ \epsilon x_2 \end{pmatrix} , \tag{4.45}$$

wobei x_i die Anzahl an Ameisen X_i bezeichnet, die an Futterquelle i fressen. Hieraus ergibt sich eine deterministische Drift von

$$\vec{f}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \epsilon(x_2 - x_1) \\ -\epsilon(x_2 - x_1) \end{pmatrix} , \tag{4.46}$$

da sich die Rekrutierungsterme gerade herausheben. Das deterministische System besitzt also einen Fixpunkt bei $x_1 = x_2 = N/2$. Die Jacobimatrix

$$\mathbf{J}_f = \begin{pmatrix} -\epsilon & +\epsilon \\ +\epsilon & -\epsilon \end{pmatrix} \tag{4.47}$$

besitzt die Eigenwerte $\{0, -2\epsilon\}$. Der Fixpunkt ist also in einer Richtung stabil und weder stabil noch instabil in der anderen. Dies liegt daran, dass der Fixpunkt $x_1 = x_2 = N/2$ eigentlich eine Fixpunktlinie darstellt, bei der jeder Punkt einer unterschiedlichen Gesamtzahl von Ameisen entspricht. Da in dieser Richtung bei festgehaltener Individuenzahl keine Bewegung möglich ist, erhalten wir den Eigenwert 0. Lediglich die Richtung, in der die Gesamtzahl der Ameisen erhalten bleibt, zeigt eine Dynamik, die im deterministischen Modell stabil ist.

4.9.2 Stochastische Simulationen und Ergebnisse von Biancali et al.

Bevor wir das Konvektionsfeld dieses Systems untersuchen, wollen wir zunächst kurz die Ergebnisse von Biancali et al. zusammenfassen und anhand von Gillespie-Simulationen einen ersten Eindruck des stochastischen Systemverhaltens erhalten. Abb. 4.2 zeigt zwei verschiedene Zeitreihen des stochastischen Systems mit unterschiedlichen Parametersätzen.

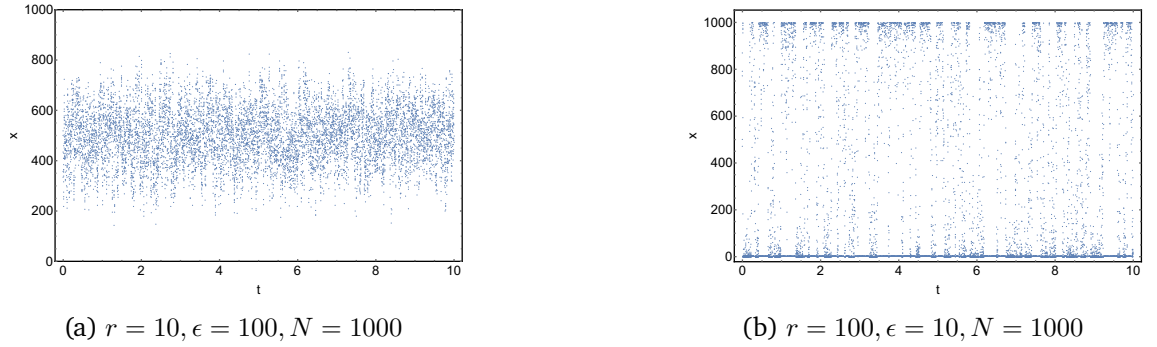


Abbildung 4.2 Zeitreihen für zwei exemplarische Simulationsdurchläufe mit unterschiedlichen Parametersätzen. Links: Niedrige Rekrutierungsrate und starker spontaner Wechsel führen dazu, dass beide Futterquellen etwa gleich stark frequentiert sind. Rechts: Hohe Rekrutierungsrate und geringe spontane Wechselrate führen zu einem bistabilen Verhalten. Gezeigt ist jeweils nur die Population an einer der beiden Futterquellen.

Wie leicht zu erkennen ist, ergibt sich nur in Abb. 4.2 (a), d.h. bei niedriger Rekrutierungsrate ein stochastisches Verhalten, welches zum deterministischen Fixpunkt bei $x_1 = x_2 = N/2$ passt. Für hohe Rekrutierungsraten jedoch (Abb. 4.2 (b)) wird das System bistabil und zu jedem Zeitpunkt frisst nahezu die gesamte Population an nur einer der beiden Futterquellen, springt jedoch stochastisch zwischen den beiden möglichen Futterquellen hin und her. Der Bifurkationsparameter, der zwischen monostabilem und bistabilem Verhalten vermittelt lautet hierbei

$$N_C = \frac{r}{\epsilon} \quad (4.48)$$

und lässt sich als kritische Systemgröße auffassen: Die Bifurkation findet hierbei genau bei $N_C = N$ statt [14].

Dies lässt sich auch anhand der Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung des auf 1D reduzierten Systems ablesen, wie in Abb. 4.3 dargestellt.

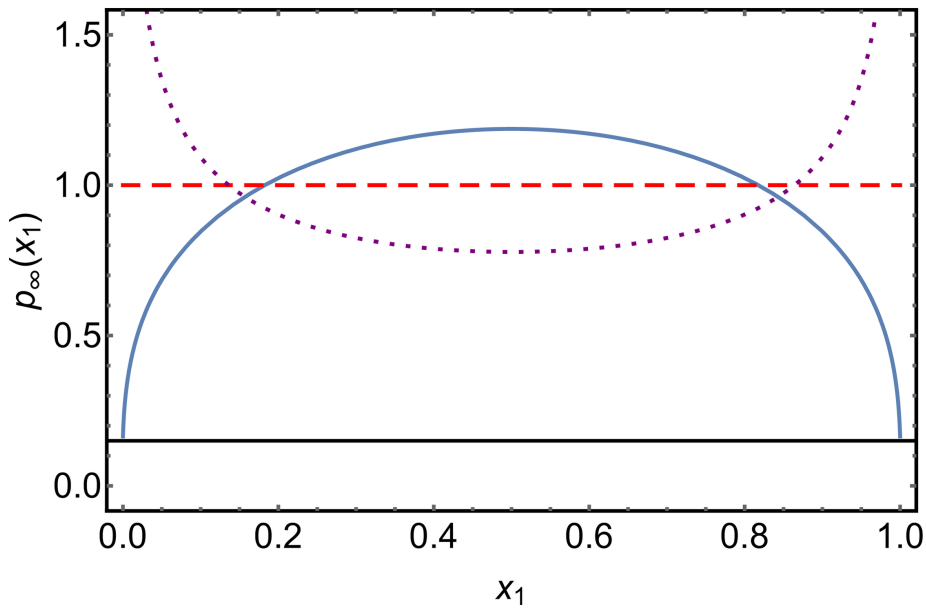


Abbildung 4.3 Lösung der stationären Fokker-Planck-Gleichung für das Ameisenmodell für verschiedene Parameterwerte: $N = 1000$ und $N_C/N = 0,75$ (blaue durchgezogene Linie); $N_C/N = 1$ (rot gestrichelte Linie); $N_C/N = 1,5$ (lila gepunktete Linie). Je nach Parameterwerten zeigt das System bistabiles oder monostabiles Verhalten, wobei sich das System mit $N_C = N$ (rot gestrichelte Linie) genau am Bifurkationspunkt befindet. Quelle: [14].

4.9.3 Vorhersagen des Konvektionsfelds

Es stellt sich nun die Frage, inwiefern das bistabile Verhalten des stochastischen Systems sowie die bei $N_C = N$ stattfindende stochastische Bifurkation anhand des Konvektionsfelds $\vec{\alpha}$ vorhergesagt werden kann. Hierzu berechnen wir zunächst die Diffusionsmatrix

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2rx_1x_2 + N\epsilon & -2rx_1x_2 - N\epsilon \\ -2rx_1x_2 - N\epsilon & 2rx_1x_2 + N\epsilon \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Hieraus ergibt sich das Konvektionsfeld

$$\vec{\alpha}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \epsilon(x_2 - x_1) \\ -\epsilon(x_2 - x_1) \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2r(x_2 - x_1) \\ -2r(x_2 - x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\epsilon - \frac{r}{N})(x_2 - x_1) \\ -(\epsilon - \frac{r}{N})(x_2 - x_1) \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

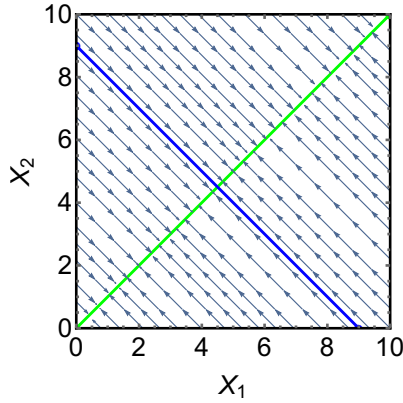
Unabhängig vom Wert der Parameter ergibt sich also der gleiche Fixpunkt bei $x_1 = x_2 = N/2$. Zunächst wirkt es daher so, als würde das bistabile Verhalten des Systems nicht korrekt erfasst werden. Bestimmt man jedoch die Jacobimatrix von $\vec{\alpha}$ ergibt sich ein anderes Bild:

$$J_{\alpha} = \begin{pmatrix} -\epsilon + \frac{r}{N} & \epsilon - \frac{r}{N} \\ \epsilon - \frac{r}{N} & -\epsilon + \frac{r}{N} \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

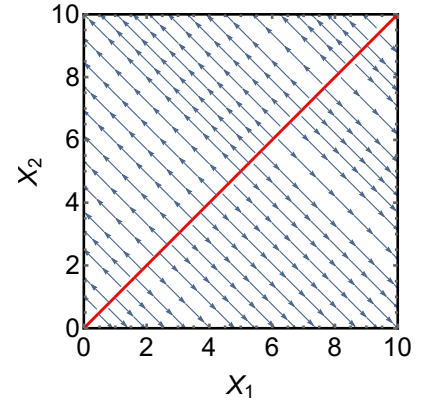
Die Eigenwerte dieser Matrix lauten $\{0, -2(\epsilon - \frac{r}{N})\}$. Der Fixpunkt bei $x_1 = x_2 = N/2$ ist also lediglich für $\frac{r}{N} < \epsilon$ und somit $N_C < N$ stabil und wird für große Rekrutierungsraten

instabil. In diesem Fall liegen die beiden Maxima der Wahrscheinlichkeitsverteilung am Rand des Definitionsbereichs und können somit vom Konvektionsfeld nicht direkt erfasst werden. Das System ist dann bistabil. Die Tatsache, dass solche Randmaxima bei der Anwendung des Konvektionsfeldes eine Rolle spielen können, ist bemerkenswert, da diese kein Analogon bei der Untersuchung deterministischer dynamischer Systeme besitzen.

Das unterschiedliche Verhalten des stochastischen Systems je nach Wahl der Parameter kann auch leicht anhand der stochastischen Phasenportraits in Abb. 4.4 nachvollzogen werden.



(a) $\frac{r}{N} = 10, \epsilon = 100$



(b) $\frac{r}{N} = 100, \epsilon = 10$

Abbildung 4.4 Stochastisches Phasenraumportrait für $N = 1000$ und unterschiedliche Parametersätze. Für $\frac{r}{N} < \epsilon$ (links) ergibt sich eine stabile Fixpunktline, genau wie im deterministischen Fall, wohingegen $\frac{r}{N} > \epsilon$ (rechts) eine instabile Fixpunktline verursacht. Aufgrund der Erhaltungsgröße ist die Dynamik auf eine eindimensionale Gerade beschränkt, auf der sich die Gesamtzahl der Ameisen nicht ändert (blaue Linie links).

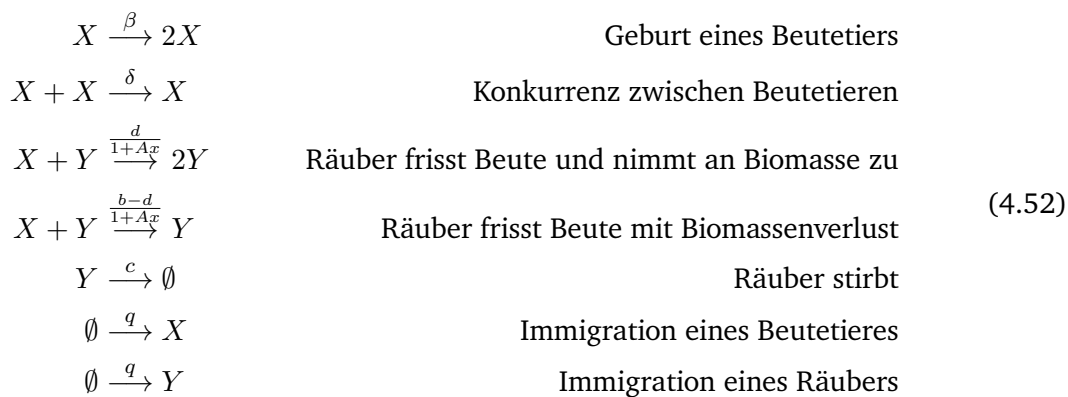
Da dieses System effektiv eindimensional ist, müssen die Fixpunkte des Konvektionsfeldes $\vec{\alpha}$ ohnehin perfekt mit den Extrema von p_s übereinstimmen und die Güte der $1/N$ -Näherung beträgt $\Gamma = 1$.

4.10 Das stochastische Rosenzweig- MacArthur- Modell

Als Beispiel für ein echt zweidimensionales Modell wollen wir nun das Rosenzweig-MacArthur-Modell betrachten [59], das in seiner deterministischen Ausprägung je nach Parametersatz einen Grenzyklus aufweisen oder eine Hopf-Bifurkation durchlaufen kann. Es kann als Verallgemeinerung des Lotka-Volterra-Modells mit zusätzlicher intraspezifischer Konkurrenz angesehen werden [60].

4.10.1 Das Rosenzweig- MacArthur- Modell als Reaktionssystem

Das Rosenzweig-MacArthur-Modell wird für gewöhnlich direkt in Form eines dynamischen Systems angegeben. Die Räuber-Beute-Interaktionen, die diesem dynamischen System zugrunde liegen, lassen sich jedoch ebenso in Form eines Reaktionssystems schreiben, wobei X für die Beute und Y für den Räuber steht:



Die Reaktionsraten $\frac{d}{1+Ax}$ bzw. $\frac{d-b}{1+Ax}$ bei der Räuber-Beute-Interaktion stellen sogenannte Holling-Typ II funktionelle Antworten dar, die in der Ökologie sehr häufig genutzt werden. Mit ihrer Hilfe lässt sich – im Gegensatz zu konstanten Reaktionsraten – auch die Sättigung des Räubers mit berücksichtigen [60, 61].

Da es sich hierbei jedoch um nicht-konstante Reaktionsraten handelt, gehorcht (4.52) nicht mehr dem Massenwirkungsgesetz. Die hier entwickelten Methoden lassen sich in der Regel aber auch auf solche Modelle weiter anwenden. Zudem lassen sich solche nicht-konstanten Reaktionsraten auch als Zusammenfassung mehrerer einfacherer Reaktionen auffassen, die jeweils dem Massenwirkungsgesetz gehorchen [62]. So ließe sich beispielsweise als Alternative zur Holling-Typ funktionellen Antwort eine weitere Spezies einführen, die einem gesättigten Räuber entspricht, der die Beute nicht weiter bejagt und zuerst wieder in einen „hungrigen Räuber“ umgewandelt werden muss. Da eine solche Zerlegung in Einzelreaktionen – vor allem im Zusammenhang mit der Einführung zusätzlicher Hilfsspezies – allerdings vergleichsweise aufwendig ist, ist es oft einfacher mit nicht-konstanten Reaktionsraten zu arbeiten. Zudem laufen solche Hilfsreaktionen meist auf anderen Zeitskalen ab als das eigentliche Reaktionssystem, was insbesondere im Hinblick auf stochastische Simulationen zu Problemen führen kann [63].

Die Immigrationsreaktionen in (4.52) sind für gewöhnlich kein Bestandteil des Rosenzweig-MacArthur- Modells, sind jedoch im stochastischen Fall nötig um ein spontanes Aussterben

einer Spezies (das sogenannte Keizer-Paradoxon [64]) zu verhindern. Hierzu genügt allerdings bereits eine äußerst geringe Immigrationsrate, sodass diese beiden Reaktionen bei der Analyse des deterministischen Systems vernachlässigt werden können [65].

Driftvektor und Diffusionsmatrix für dieses System lauten

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} q - R \cdot \frac{b}{d} + x \left(\beta - \delta \left(x - \frac{1}{N} \right) \right) \\ q + R - cy \end{pmatrix} \quad (4.53)$$

sowie

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} q + R \cdot \frac{b}{d} + x \left(x - \frac{1}{N} \right) \delta + x\beta & -R \\ -R & q + R + cy \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

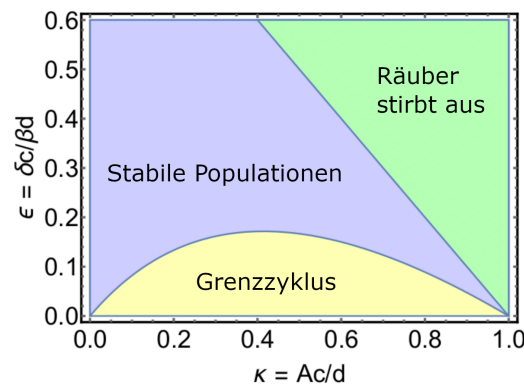
mit der Abkürzung $R = \frac{dxy}{1+Ax}$. Die Kleinbuchstaben x und y geben die jeweiligen Spezieskonzentrationen von X und Y an.

4.10.2 Eigenschaften des deterministischen Modells

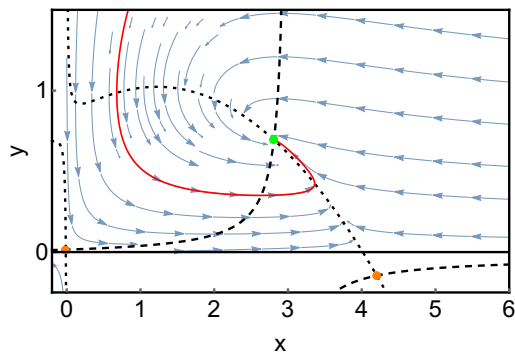
Je nach Wert der effektiven Parameter $\kappa = Ac/d$ und $\epsilon = \frac{\delta c}{\beta d}$ zeigt das deterministische System

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{f}(\vec{x}) \quad (4.55)$$

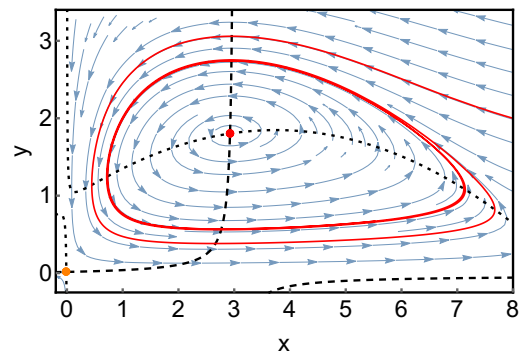
entweder stabile Populationen beider Spezies, einen Grenzyklus bei dem beide Populationsgrößen oszillieren oder ein Aussterben des Räubers [60]. Die Parameterabhängigkeit dieser Regime ist im Stabilitätsdiagramm in Abb. 4.5 (a) verdeutlicht, gemeinsam mit (deterministischen) Phasenportraits des Systems für zwei verschiedene Parametersätze in Abb. 4.5 (b) und (c).



(a)



(b)



(c)

Abbildung 4.5 (a) Stabilitätsdiagramm des umskalierten Rosenzweig-MacArthur-Modells mit effektiven Parametern κ und ϵ .

(b) (Deterministisches) Phasenportrait des Rosenzweig-MacArthur-Modells mit stabiler Spirale: Blaue Stromlinien stellen die deterministische Drift $\vec{f}(\vec{x})$ dar; Schwarze Kurven die Nulklinen, wo eine Komponente von $\vec{f}(\vec{x})$ verschwindet. Eine Beispieltrajektorie ist in rot gezeigt. Die grünen bzw. roten Punkte stellen die stabilen bzw. instabilen Fixpunkte des Systems dar. Die Parameter des Systems lauten: $A = 2/3$; $d = 0,65$; $c = 0,65$; $b = 1$; $q = 0,01$; $\delta = 0,2$; $\beta = 0,8$.

(c) (Deterministisches) Phasenportrait des Rosenzweig-MacArthur-Modells mit Grenzzzyklus. Genutzt wurden $\delta = 0,1$; $\beta = 0,9$; die übrigen Parameter sind unverändert gegenüber (b).

4.10.3 Auswirkungen stochastischer Effekte im System mit deterministisch stabiler Spirale

Abb. 4.6 zeigt stochastische Phasenportraits (SPPs) für den Parametersatz in Abb. 4.5 (b), bei dem das deterministische System in eine stabile Spirale läuft. Zwischen den einzelnen Feldern der Grafik wurde lediglich die Systemgröße N variiert, über die sich die Stärke des intrinsischen Rauschens regulieren lässt.

Um die Aussagekraft dieser SPPs zu bewerten, wurden zudem Gillespie-Simulationen des Reaktionssystems (4.52) durchgeführt, deren Zeitreihen als Dichtehistogramm (gelbe Schattierung) mit eingezeichnet wurden. Diese Histogramme entsprechen der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s .

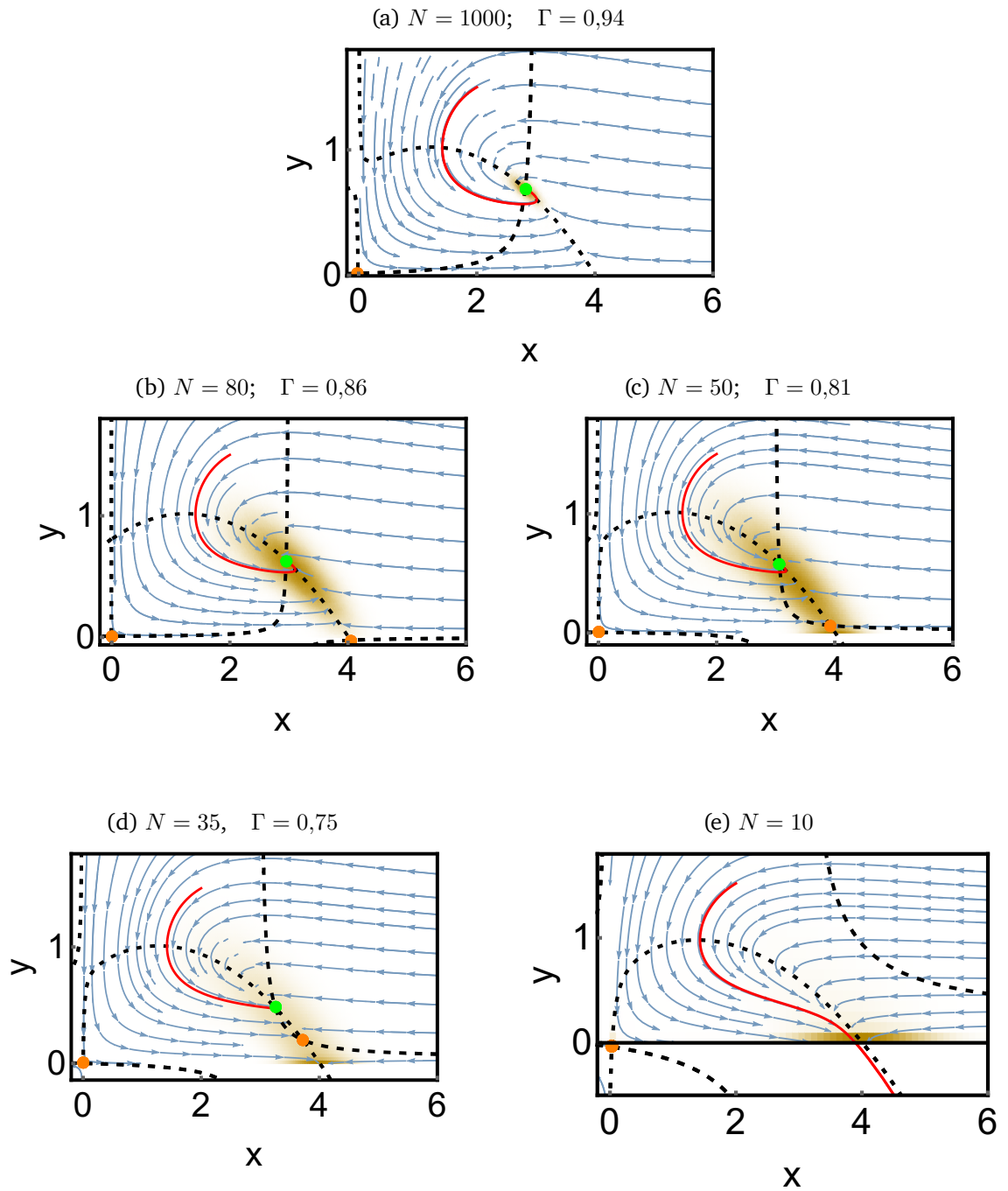


Abbildung 4.6 SPPs des Rosenzweig-MacArthur-Modells für den Fall mit deterministisch stabiler Spirale für verschiedene Systemgrößen. Die Parameter sind dieselben wie in in Abb. 4.5(b). Die gelben Schattierungen stellen ein Dichtehistogramm des stochastisch simulierten Modells dar. Hierzu wurde eine genügend lange stochastische Trajektorie des Systems simuliert und nach Abschneiden der anfänglichen Transienten alle Punkte des Systems aggregiert. Die Farbcodierung ist dieselbe wie in Abb. 4.5. Zusätzlich ist in rot eine Pseudotrajektorie des dynamischen Systems (4.42) gezeigt. Die angegebene Güte Γ der Vorhersage der p_s -Extrema nach (4.41) wurde jeweils am Ort des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts berechnet.

Für die große Systemgröße $N = 1000$ weist das SPP in Abb. 4.6 (a) eine sehr gute Übereinstimmung mit dem deterministischen Phasenportrait in Abb. 4.5 (b) auf. Die Fluktuationen um das Maximum, die aus den stochastischen Simulationen ersichtlich werden, sind vergleichsweise klein. Für die kleinere Systemgröße $N = 80$ ergibt sich ein ähnliches Bild, wobei sich die Breite der Verteilung, die sich aus dem Dichtehistogramm ablesen lässt, durch die Zunahme des intrinsischen Rauschens vergrößert. Das Maximum der Verteilung fällt jedoch weiterhin mit dem stabilen Fixpunkt des SPPs zusammen. Diese Übereinstimmung wird erst für $N = 50$ schlechter: Während das SPP weiterhin nur den einen stabilen Fixpunkt anzeigt, wird p_s – wie die Simulationsdaten belegen – bistabil und ein zweites Maximum am Rande des Definitionsbereichs entsteht. Wie wir bereits am Beispiel des Ameisenmodells gesehen haben, werden solche Randmaxima nur indirekt vom Konvektionsfeld erfasst und werden daher auch nicht als Fixpunkt im SPP sichtbar. Wir können dieses Auftreten eines zweiten Wahrscheinlichkeitsmaximums als eine Art stochastische Bifurkation ansehen, die wir im folgenden Abschnitt noch genauer analysieren werden. Für noch kleinere Systemgrößen, wie beispielsweise $N = 35$, gewinnt dieses Randmaximum weiter an Bedeutung, während das vom Konvektionsfeld erfasste Maximum immer weniger Wahrscheinlichkeitsmasse beinhaltet, bis es schließlich bei $N = 10$ gänzlich verschwunden ist, was sich nun auch im SPP widerspiegelt: Für sehr kleine Systeme schneiden sich die beiden Nullklinen nicht mehr, wodurch eine Sattelknotenbifurkation in $\vec{\alpha}$ auftritt und das System im Bereich positiver Populationsdichten keinen stabilen Fixpunkt mehr aufweist. Auch das Verschwinden dieses Maximums, stellt eine stochastische Bifurkation dar.

Betrachtet man das stochastische Phasenportrait für $N = 10$ genauer, lässt sich bereits erahnen, wieso solche Randmaxima entstehen: Da im Inneren des verfügbaren Phasenraums keine stabilen Fixpunkte mehr vorhanden sind, wird der Wahrscheinlichkeitsfluss grob entlang der vom Konvektionsfeld vorgegebenen Bahn fließen, solange bis die Grenze des Phasenraums (in diesem Fall die x -Achse) erreicht ist. Von hier aus kann der Wahrscheinlichkeitsfluss dem Konvektionsfeld jedoch nicht weiter folgen, da negative Populationsdichten stets die Wahrscheinlichkeit Null behalten müssen. Die einzige Möglichkeit ist somit, dass Wahrscheinlichkeitsmasse entlang der x -Achse weiter fließt, solange bis die x -Komponente von $\vec{\alpha}(\vec{x})$ verschwindet. Dies geschieht natürlich genau an der Stelle, an der die x -Nullkline von $\vec{\alpha}$ die x -Achse schneidet. Randmaxima entstehen also immer an Orten, wo eine $\vec{\alpha}$ -Nullkline ihre jeweilige Koordinatenachse schneidet.

4.10.4 Nullklinen-Lücken-Bifurkation

Mit diesem Verständnis der Randmaxima wollen wir die Bifurkation, die zu deren Entstehung führt, noch einmal genauer betrachten. In unserem System findet diese bei einer kritischen Systemgröße N_C statt, die zwischen $N = 80$ und $N = 50$ liegt. Vergleicht man die stochastischen Phasenportraits dieser beiden Systemgrößen (Abb. 4.6(b) und (c)) fällt auf, dass die beiden y -Nullklinen am unteren Rand ihre Richtung vertauschen.

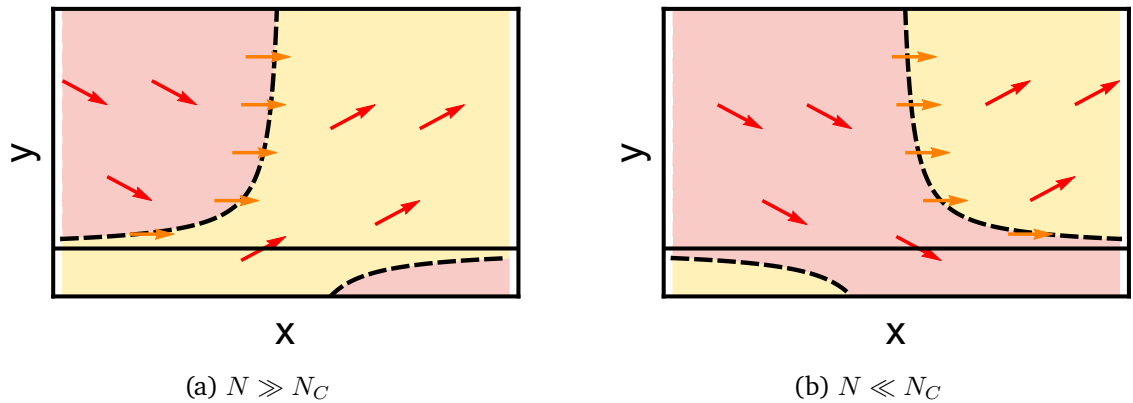


Abbildung 4.7 Schematische stochastische Phasenportraits zur Illustration der Nullklinen-Lücken-Bifurkation. Die Nullklinen (schwarz gestrichelt) geben die Orte im Zustandsraum an, an denen die Vektoren des Konvektionsfeldes vollkommen waagrecht stehen (orangene Pfeile). Hierdurch wird der Zustandsraum in zwei unterschiedliche Regionen aufgeteilt, in denen die y -Komponente aller Vektoren entweder positiv (gelb hinterlegt) oder negativ (rot hinterlegt) ist.

(a) Für große Systemgrößen $N \gg N_C$ befindet sich die Nullklinen-Lücke im positiven (gelben) Bereich, sodass alle Wahrscheinlichkeitsmasse im Inneren des Zustandsraums verbleibt und sich keine Randmaxima ausbilden können. (b) Für kleine Systemgrößen $N \ll N_C$ tritt die Nullklinen-Lücke innerhalb der negativen (roten) Region auf. Hierdurch kann Wahrscheinlichkeitsmasse durch die Lücke entkommen und den Rand des Zustandsraums (in diesem Fall die x -Achse) erreichen, sodass ein Randmaximum entsteht.

Dies ist auch noch einmal schematisch in Abb. 4.7 dargestellt. Hier stellen erneut die schwarz gestrichelten Linien die y -Nullklinen dar. Dadurch, dass sich ihr Verhalten in der Nähe der x -Achse qualitativ verändert, ändert sich auch das Verhalten des Konvektionsfeldes: Solange die $\vec{\alpha}$ -Vektoren im Bereich der Nullklinen-Lücke nach oben zeigen (Abb. 4.7 (a)) fließt dort Wahrscheinlichkeitsmasse von der x -Achse weg, sodass kein Randmaximum entstehen kann. Zeigen die $\vec{\alpha}$ -Vektoren jedoch nach unten (Abb. 4.7 (b)), kann Wahrscheinlichkeitsmasse durch die Lücke zwischen den beiden Nullklinen nach unten hin in Richtung der x -Achse entweichen und ein Randmaximum entsteht.

Da das Entstehen eines Randmaximums direkt durch diese Änderung der Nullklinen-Lücke ausgelöst wird, wollen wir diese Art der stochastischen Bifurkation als *Nullklinen-Lücken-Bifurkation* bezeichnen.

4.10.5 Auswirkungen stochastischer Effekte im System mit deterministischem Grenzzyklus

Abb. 4.8 zeigt SPPs für den Parametersatz in Abb. 4.5 (c), bei dem das deterministische System einen Grenzzyklus aufweist.

Auch bei diesem Parametersatz lässt sich für die große Systemgröße $N = 1000$ eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem SPP in Abb. 4.8 (a) und dem deterministischen Phasenportrait in Abb. 4.5 (c) feststellen. Das zugehörige Dichtehistogramm zeigt zudem, dass die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort des Grenzzyklus im SPP konzentriert ist. Für $N = 80$ wird die Wahrscheinlichkeitsdichte erneut breiter. Bei etwa $N = 65$ (nicht dargestellt)

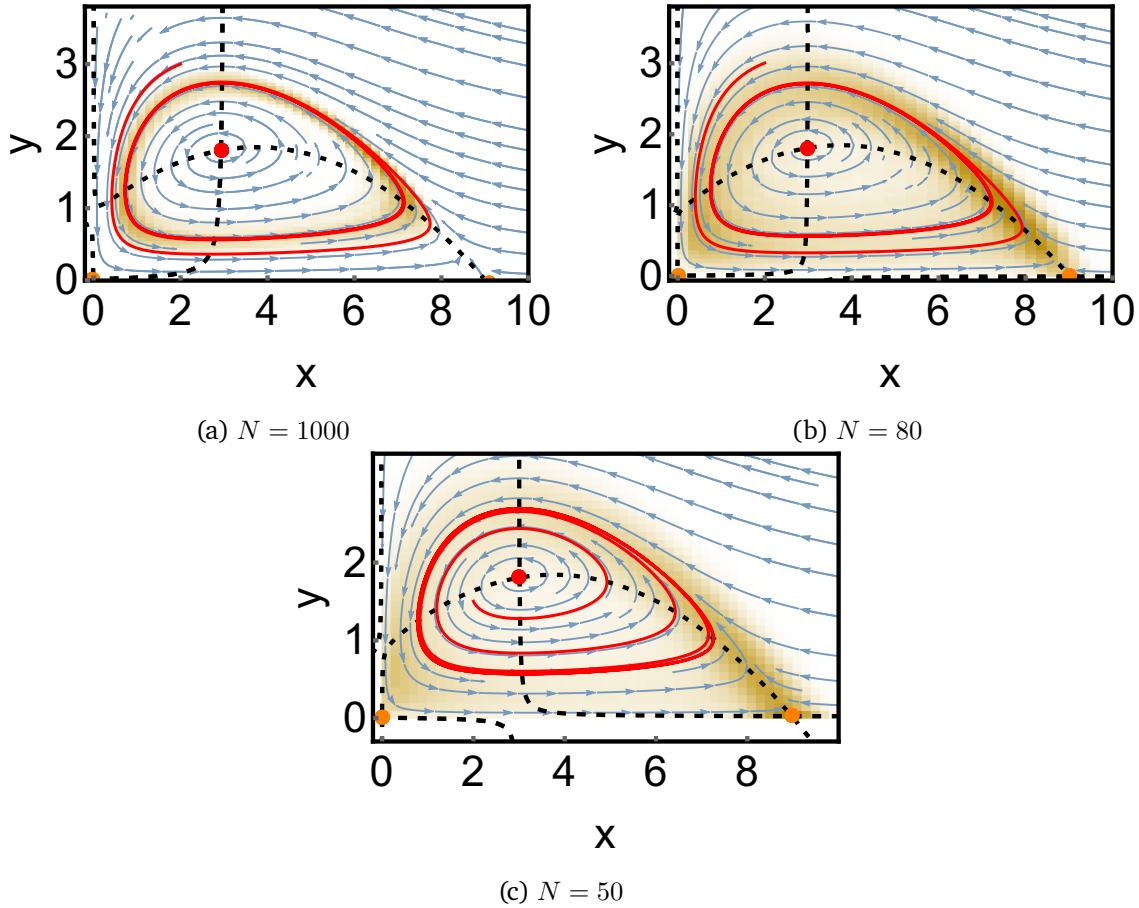


Abbildung 4.8 SPPs des Rosenzweig-MacArthur-Modells für einen Parametersatz mit deterministischem Grenzzyklus und verschiedene Systemgrößen. Die Parameter sind identisch mit Abb. 4.5(c). Die Farben entsprechen denen der bisherigen Abbildungen. Gelbe Schattierungen weisen erneut auf die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte aus einer stochastischen Simulation des Systems hin. Die Güte der Näherung am p_s -Minimum kann über (4.41) nicht ermittelt werden, da die Wahrscheinlichkeitsdichte dort als Normalverteilung genähert wird, was nur am Ort eines Maximums sinnvoll ist.

tritt eine Nullklinen-Lücken-Bifurkation auf, die die Ausbildung eines Randmaximums bei ungefähr $x \approx 9$ für die kleinere Systemgröße von $N = 50$ zur Folge hat.

Betrachtet man den Grenzzyklus – beispielsweise in Abb. 4.8 (a) – genauer, fällt auf, dass einzelne Zustände auf dem Grenzzyklus eine deutlich höhere Wahrscheinlichkeitsdichte aufweisen als andere (dargestellt durch eine dunklere gelbe Schattierung). Dies sind die langsamen transienten Zustände des Systems, die wir bereits in Abschnitt 4.5 eingeführt haben. Wie bereits diskutiert, stehen diese nicht mit Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ in Zusammenhang, sondern entstehen durch die Verlangsamung bzw. Beschleunigung des Wahrscheinlichkeitsflusses \vec{j}_s entlang des Kraters. Das Auftreten dieser Maxima steht zunächst im Widerspruch zu den Ausführungen in Abschnitt 4.6, wo wir festgestellt hatten, dass \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ den Höhenlinien von p_s folgt. Tatsächlich sind die dortigen Resultate jedoch auf Grenzzyklen nicht vollständig anwendbar. Um dies im Detail zu verstehen, ist jedoch noch einige Vorarbeit nötig, weshalb wir hierauf erst in Abschnitt 5.5.1 noch einmal zurückkommen werden.

4.10.6 Auswirkungen stochastischer Effekte auf die Hopf-Bifurkation

Nachdem wir in den vergangenen Abschnitten die Auswirkungen stochastischer Effekte auf das Rosenzweig-MacArthur-Modell mit stabiler Spirale und mit Grenzzyklus diskutiert haben, liegt es nahe auch die Hopf-Bifurkation näher zu betrachten, bei der die beiden möglichen stationären Zustände des deterministischen Systems ineinander übergehen. Mit zunehmender Systemgröße N werden der Krater von p_s und der Grenzzyklus in $\vec{\alpha}$ immer besser übereinstimmen, da beide gegen das Verhalten des deterministischen Systems konvergieren müssen. Dies bedeutet, dass die Hopfbifurkation in der deterministischen Drift \vec{f} von einem Übergang von Berg zu Krater in der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte begleitet werden muss, wenn N ausreichend groß ist. Ob und inwieweit der kritische Parameterwert, der diese stochastische Bifurkation auslöst, gegenüber dem Wert der deterministischen Hopfbifurkation verschoben ist, wäre sicherlich interessant zu beantworten.

In der Praxis lässt sich dieser Übergang in unserem Modell aber nur sehr eingeschränkt untersuchen: Zum Einen ist es schwierig, den genauen Parameterwert, an dem die Hopf-Bifurkation auftritt, anhand von stochastischen Simulationen zu ermitteln, da sowohl die stabile Spirale als auch ein enger Grenzzyklus zu nahezu identischen stationären Wahrscheinlichkeitsdichten führen. Der kritische Parameterwert, an dem die Bifurkation auftritt, lässt sich somit nur mit äußerst geringer Genauigkeit ermitteln. Zum Anderen wird dieser kritische Wert für große Systemgrößen weiterhin sehr nah am deterministischen Wert liegen und nur für kleine Systemgrößen können sich signifikante Abweichungen ergeben, die einen Test der Vorhersagen der SPPs ermöglichen. Dies ist allerdings problematisch, da in unserer Version des Rosenzweig-MacArthur-Modells – wie wir im vergangenen Abschnitt gesehen haben – für kleine Systemgrößen eine Nullklinen-Lücken-Bifurkation auftritt, bei der ein Großteil der Wahrscheinlichkeitsmasse zum Rand hin abfließt. Hierdurch wird eine genaue Analyse der stochastischen Hopfbifurkation noch zusätzlich erschwert. Wir kommen daher zu dem Schluss, dass unsere Version des Rosenzweig-MacArthur-Modells für eine genaue Analyse der stochastischen Hopf-Bifurkation und der Vorhersagekraft des Konvektionsfeldes in diesem Szenario ungeeignet ist.

Diese Problematik wurde in [66] von Lara Becker noch einmal aufgegriffen, wo unter anderem die Vorhersagekraft des Konvektionsfeldes für eine rauschinduzierte Hopfbifurkation am Beispiel des Brusselators untersucht wird. Hier konnte allerdings gezeigt werden, dass rauschinduzierte Hopfbifurkationen, die allein durch eine Verkleinerung der Systemgröße ausgelöst werden, keinen Übergang von Berg zu Krater in der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte aufweisen.

4.11 Fazit

Es ist uns in diesem Kapitel gelungen, das Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$ von einer auf zwei Dimensionen zu erweitern. Hierbei trat das Problem zutage, dass ein Fixpunkt von $\vec{\alpha}$ nun nicht mehr länger ein p_s -Extremum garantieren kann, solange dort nicht auch $\vec{j}_s = 0$ ist. Obwohl praktisch keine relevanten gekoppelten Zwei-Spezies-Reaktionssysteme existieren bei denen \vec{j}_s vollkommen verschwindet, lässt sich das Konvektionsfeld hier zumindest noch auf präferierte bzw. gemiedene Zustände anwenden, an denen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte lokal null

wird. Durch Nähern von \vec{j}_s für große Systemgrößen N konnten wir zeigen, dass praktisch alle Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ solche Zustände darstellen, solange an deren Ort $|\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha}| \gg 0$ gilt. Mithilfe dieser Näherung ist es möglich die Güte der Vorhersage des Konvektionsfeldes am Ort eines Fixpunkts im Vorhinein zu bestimmen, ohne dass die Fokker-Planck-Gleichung gelöst werden muss.

Betrachtet man das Konvektionsfeld als die rechte Seite eines dynamischen Systems $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{\alpha}(\vec{x})$, ergeben sich zwar keine echten Trajektorien des Systems, jedoch lassen sich Phasenportraits des stochastischen Systems anfertigen. Beim Modell nahrungssuchender Ameisen von Biancali et al. konnten wir mithilfe dieser Phasenportraits sowie des Konvektionsfeldes im Allgemeinen das stochastische Verhalten des Systems auf sehr elegante Art – ganz analog zur deterministischen Vorangehensweise – berechnen. Im Gegensatz zu vorherigen Untersuchungen dieses Modells, war hierbei kein explizites Lösen der zugrunde liegenden Fokker-Planck-Gleichung notwendig.

Bei der anschließenden Untersuchung des stochastischen Rosenzweig-MacArthur-Modells zeigte sich, dass die stochastischen Phasenportraits bereits eine recht gute Anschauung des Langzeitverhaltens des stochastischen Systems liefern können. Auch lässt sich die stochastische Sattelnodenbifurkation, die zur Auslöschung der stabilen Spirale für kleine Systemgrößen führt, direkt anhand des SPPs ablesen. Durch genaue Analyse des SPPs lassen sich zudem auch Randmaxima des Systems identifizieren. Hierbei konnten wir auch eine neue Art von stochastischer Bifurkation identifizieren, die zum Entstehen solcher Randmaxima führt: Die Nullklinen-Lücken-Bifurkation.

Trotz dieser Erfolge stellen die hier entwickelten Methoden der stochastischen Phasenportraits und des Konvektionsfeldes jedoch recht grobe Vereinfachungen des zugrunde liegenden stochastischen Systems dar, sodass sich niemals alle Eigenschaften des stochastischen Systems auf diese Weise analysieren lassen werden. Hierzu zählt beispielsweise die fehlende Möglichkeit die Höhe der jeweiligen p_s -Maxima zu bestimmen. Ebenso lässt sich die Breite der Verteilung zwar in gaußförmiger Näherung in der Nähe eines Maximums von p_s ermitteln, hierbei wird allerdings weder die Schiefe der Verteilung noch der Einfluss benachbarter Maxima berücksichtigt, was insbesondere bei der Untersuchung stochastischer Bifurkationen von entscheidender Bedeutung ist.

Während die Tatsache, dass $\vec{\alpha}$ nicht alle Eigenschaften des vollen stochastischen Systems erfassen kann, weder unerwartet noch problematisch ist, bleibt zudem die Frage offen, inwieweit die Vorhersagen des Konvektionsfeldes weiterhin von Nutzen sein können, wenn der führende Term der $1/N$ -Entwicklung verschwindet, sodass $\Gamma = 0$ wird und die Extrema von p_s nicht mehr mit den Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ übereinstimmen.

Wie wir im folgenden Kapitel sehen werden, hängt diese Frage eng mit der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s des Systems zusammen, die zudem weitere Informationen über das Langzeitverhalten von Nichtgleichgewichtssystemen, wie beispielsweise dem Rosenzweig-MacArthur-Modell, liefern kann.

5 Untersuchung der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Bislang haben wir uns mit der Frage beschäftigt wie sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte p_s eines stochastischen Systems ohne explizites Lösen der zugehörigen Fokker-Planck-Gleichung abschätzen lässt. Auch wenn p_s bereits zahlreiche Erkenntnisse über das Langzeitverhalten eines stochastischen Systems liefert, ist es oftmals interessant auch die stationären Wahrscheinlichkeitsströme \vec{j}_s , die im System auftreten, genauer zu untersuchen. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn das System auf einen Nichtgleichgewichtszustand läuft wie beispielsweise den Grenzzyklus im Rosenzweig-Mac-Arthur-Modell.

Wir wollen uns daher im dritten Teil dieser Arbeit damit beschäftigen wie sich der stationäre Wahrscheinlichkeitsstrom eines stochastischen Systems anhand von Konvektionsfeld und Diffusionsmatrix abschätzen lässt und welche Auswirkungen verschiedene Kopplungsterme zwischen den einzelnen Spezies auf die Topologie von \vec{j}_s haben. Hierbei werden wir auch klären, was geschieht wenn die Näherung (4.36) der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte für große N aus dem vorherigen Kapitel versagt. Die Ergebnisse dieses Kapitels haben zur Publikation [54] geführt.

5.1 Korrespondenz zwischen $\vec{\alpha}$ - und \vec{j}_s -Fixpunkten für große N

Aus unseren bisherigen Überlegungen geht bereits hervor, dass Fixpunkte von \vec{j}_s mit den Fixpunkten des Konvektionsfeldes $\vec{\alpha}$ sowie den Extrema von p_s übereinstimmen, solange dort $|\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha}| \gg 0$ gilt. Offen geblieben ist jedoch die Frage, um welche Art von \vec{j}_s -Fixpunkt es sich jeweils handelt.

Hierzu sei zunächst angemerkt, dass für die Fixpunkte von \vec{j}_s als divergenzfreies Vektorfeld – wie in Abschnitt 2.6 dargelegt – grundsätzlich nur Zentren und Sattelpunkte infrage kommen.

Weiterhin haben wir bereits in Abschnitt 4.6 gesehen, dass \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ den Höhenlinien von p_s folgt. Dies bedeutet, dass sich \vec{j}_s in geschlossenen Linien um die Maxima und Minima von p_s bewegt und folglich, dass der \vec{j}_s -Fixpunkt am Ort eines solchen p_s -Extremums bzw. $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts immer ein Zentrum sein muss.

Besitzt p_s einen Sattelpunkt, ist – der gleichen Argumentation folgend – zunächst anzunehmen, dass auch \vec{j}_s einen Sattelpunkt aufweisen wird. Dies ist zwar im Rahmen der Näherung in führender Ordnung in $1/N$ korrekt, jedoch ist es in bestimmten Konstellationen für j_s aus topologischen Gründen unmöglich am Ort eines p_s -Sattels überhaupt einen Fixpunkt auszubilden. In diesem Fall bricht die $1/N$ -Näherung zusammen und höhere Terme in $1/N$ bestimmen den Verlauf von \vec{j}_s . Wir werden diesen Grenzfall in Abschnitt 5.5.3 noch ausführlicher diskutieren.

Wir können den Zusammenhang zwischen den Fixpunkten von \vec{j}_s und $\vec{\alpha}$ auch explizit berechnen. Hierzu beschränken wir uns der Einfachheit halber auf den Fall $\mathbf{D} \propto \mathbf{1}$ und linearisieren ein allgemeines Konvektionsfeld um den betrachteten Fixpunkt, den wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit an den Koordinatenursprung setzen:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + ey \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Die Jacobimatrix lautet dann

$$J_{\vec{\alpha}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & e \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(-\tau \pm \sqrt{\tau^2 - 4\Delta} \right), \quad (5.3)$$

mit $\tau = \text{Sp}(J_{\vec{\alpha}}) = a + e$ und $\Delta = \det(J_{\vec{\alpha}}) = ae - bc$.

Weiterhin können wir $\vec{\alpha}_{\parallel}$ und $\vec{\alpha}_{\perp}$ berechnen:

$$\vec{\alpha}_{\parallel} = \begin{pmatrix} \frac{a+e}{\eta} (\Pi y + (\Delta + a^2 + c^2) x) \\ \frac{a+e}{\eta} (\Pi x + (\Delta + b^2 + e^2) y) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

$$\vec{\alpha}_{\perp} = \begin{pmatrix} \frac{b-c}{\eta} (\Pi x + (\Delta + b^2 + e^2) y) \\ -\frac{b-c}{\eta} (\Pi y + (\Delta + a^2 + c^2) x) \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

mit $\eta = (b - c)^2 + (a + e)^2$, $\Pi = ab + ce$ und $\Delta = \det(J_{\alpha}) = ae - bc$.

Da in führender Ordnung $\vec{j}_s = \vec{\alpha}_{\perp} \cdot p_s$ ist, können wir die Jacobimatrix von \vec{j}_s als $J(\vec{j}_s) = J(\vec{\alpha}_{\perp}) \cdot p + R$ schreiben, wobei jeder Eintrag der Restmatrix R proportional zu einer Ableitung von p_s ist und somit am Ort des Fixpunkts verschwindet. Dies bedeutet, dass die Art eines \vec{j}_s -Fixpunkts stets mit der Art eines (fiktiven) $\vec{\alpha}_{\perp}$ -Fixpunkts am gleichen Ort übereinstimmt.

Die Jacobimatrix von $\vec{\alpha}_{\perp}$ ist gegeben durch:

$$J_{\vec{\alpha}_{\perp}} = \frac{1}{\eta} \begin{pmatrix} (b - c)\Pi & (b - c)(\Delta + b^2 + e^2) \\ -(b - c)(\Delta + a^2 + c^2) & -(b - c)\Pi \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

und hat die Eigenwerte

$$\mu_{\pm} = \pm \frac{(b - c)\Delta}{\sqrt{-\Delta\eta}}. \quad (5.7)$$

Da $\eta > 0$, sind dies entweder zwei reelle Zahlen mit unterschiedlichem Vorzeichen oder ein komplex konjugiertes Zahlenpaar mit verschwindendem Realteil. Der erste Fall tritt für $\Delta < 0$ ein und impliziert einen Sattelpunkt $\vec{\alpha}_{\perp}$ und somit in \vec{j}_s . Zudem wissen wir aus (5.3) dass dies einem Sattelpunkt in $\vec{\alpha}$ entspricht. Der zweite Fall tritt für $\Delta > 0$ ein und impliziert ein Zentrum in $\vec{\alpha}_{\perp}$ und somit in \vec{j}_s . Tatsächlich sind also alle Fixpunkte in $\vec{\alpha}$, die keine Sattelpunkte sind, mit Zentren in \vec{j}_s assoziiert.

Für den Spezialfall $b = c$, der der allgemeineren Bedingung $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha}(\vec{x}_0) = 0$ entspricht, verschwinden beide Eigenwerte. Dies ist auch plausibel, da in diesem Fall die Näherung in führender Ordnung in $1/N$ zusammenbricht und im Allgemeinen überhaupt kein \vec{j}_s -Fixpunkt mehr vorhanden ist. Stattdessen wird sich ein Dipolstrom einstellen, wie wir in den folgenden Abschnitten sehen werden.

5.2 Der Rotationssinn von \vec{j}_s

Neben den Fixpunkten von \vec{j}_s , liefert auch der Rotationssinn von \vec{j}_s um einen solchen Fixpunkte wertvolle Einblicke in die Topologie der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Wir wollen daher nun nach Möglichkeiten suchen wie sich dieser Rotationssinn anhand von Konvektionsfeld und Diffusionsmatrix abschätzen lässt.

Hierbei führen wir uns zunächst vor Augen, dass sich die Rotation eines beliebigen Vektorfeldes $\vec{v}(\vec{x})$ am Ort \vec{x}_0 stets in zwei unabhängige Beiträge aufteilen lässt, wobei ein Beitrag den zirkulären Fluss des Vektorfeldes um den Punkt \vec{x}_0 beschreibt, während der zweite, weniger intuitive Term durch die Änderung der Norm des Vektorfeldes in einer Umgebung von \vec{x}_0 induziert wird. Hierzu nutzen wir die Darstellung $\vec{v}(\vec{x}) = |v| \cdot \vec{e}_v$ von $\vec{v}(\vec{x})$ in Polarkoordinaten und schreiben

$$\vec{\nabla} \times \vec{v} = \vec{\nabla} \times \vec{e}_v \cdot |v| + \vec{\nabla}|v| \times \vec{e}_v . \quad (5.8)$$

Am Ort eines Fixpunkts von $\vec{v}(\vec{x})$ verschwindet der zweite Term und die Rotation entspricht dem zirkulären Fluss des Vektorfeldes um den Fixpunkt. In diesem Fall können wir das Vorzeichen des verbleibenden ersten Terms als den Rotationssinn von \vec{v} um diesen Fixpunkt ansehen.

Wir berechnen nun zunächst einige Eigenschaften der Rotation von \vec{j}_s . Aus (4.3) erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{j}_s &= \vec{\nabla} \times \left(\mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} p_s - \frac{1}{2N} \vec{\nabla} p_s \right) \\ &= \vec{\nabla} \times (\mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} p_s) . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Am Ort eines Extremums von p_s , verschwindet $\vec{\nabla} p_s$ und die obige Relation vereinfacht sich zu

$$\text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{j}_s \right) = \text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} \right) \quad (5.10)$$

$$= \text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha}_\perp \right) . \quad (5.11)$$

Im letzten Schritt haben wir die Zerlegung aus Abschnitt 4.6 genutzt.

Obwohl es keine direkte Möglichkeit gibt von $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{j}_s$ auf $\vec{\nabla} \times \vec{j}_s$ zu schließen, können wir dennoch in vielen Fällen erwarten, dass $\text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{j}_s \right) = \text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s \right)$ sein wird, da die Diffusionsmatrix in der Regel eine gewisse Ähnlichkeit zur Einheitsmatrix aufweist, sodass sich das Vorzeichen der Rotation von \vec{j}_s durch Multiplikation mit \mathbf{D}^{-1} nicht ändert. Dies liegt daran, dass die Diffusion positiv definit und in den meisten Systemen nahezu isotrop ist, da sich die Rauschstärke der verschiedenen Spezies nicht allzu sehr voneinander unterscheidet, sodass eine Multiplikation mit \mathbf{D}^{-1} oftmals nur geringe Abweichungen von der Multiplikation mit einer skalaren Konstante aufweist.

Dennoch wollen wir im Folgenden zwei Spezialfälle diskutieren, in denen wir an explizite Informationen über $\text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s \right)$ gelangen können: Der erste Fall ist derjenige großer N , wo wir am Ort eines p_s -Extremums aus (4.36)

$$\text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s \right) = \text{sgn} \left(\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}_\perp \right) . \quad (5.12)$$

erhalten. Hier müssen wir also lediglich die Komponente $\vec{\alpha}_\perp$ berechnen und erhalten direkt den Rotationssinn von \vec{j}_s .

Der zweite Fall ist derjenige konstanter, isotroper Diffusion

$$\mathbf{D} = d \cdot \text{Id} . \quad (5.13)$$

Hier erhalten wir aus (5.10) und (4.4)

$$\text{sgn}(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s) = \text{sgn}(\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}) = \text{sgn}(\vec{\nabla} \times \vec{f}) \quad (5.14)$$

und können nun sogar auf die Zerlegung von $\vec{\alpha}$ verzichten.

Außerhalb eines Extremums von p_s stimmen das Vorzeichen der Rotation von \vec{j}_s und der Rotationssinn von \vec{j}_s nicht zwangsläufig überein. Dies lässt sich besonders leicht am Fall konstanter, isotroper Diffusion (5.13) klar machen, bei dem sich (5.9) zu

$$\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = \vec{\nabla} \times \vec{f} \cdot p_s + \vec{\nabla} p_s \times \vec{f} . \quad (5.15)$$

vereinfacht. Das Vorzeichen des ersten Terms entspricht in dieser Schreibweise dem Rotationssinn von \vec{j}_s um den p_s -Fixpunkt.

Der zweite Term von (5.15) hingegen liefert außerhalb eines p_s -Extremums ebenfalls einen Beitrag. Zeigen $\vec{\nabla} p_s$ und \vec{f} tendenziell eher in die selbe Richtung wie beispielsweise in der Nähe eines p_s -Maximums, besitzen die beiden Terme entgegengesetzte Vorzeichen. In der Nähe eines Minimums hingegen sind die Vorzeichen beider Terme identisch. Im erstgenannten Fall ist es sogar möglich, dass dieser zweite Term dominiert, sodass das Vorzeichen von \vec{j}_s in der Umgebung eines Maximums umgekehrt wird und nicht mehr dem Rotationssinn von \vec{j}_s um dieses Maximum entspricht.

Um dieses Phänomen genauer zu verstehen, wollen wir im folgenden Abschnitt ein rotationssymmetrisches Beispielsystem mit konstanter, isotroper Diffusion (5.13) untersuchen, welches sich im Limes großer N explizit lösen lässt.

5.2.1 Beispiel: Rotationssymmetrisches Modell

Wir betrachten eine allgemeine deterministische Drift $\vec{f}(\vec{x})$ mit Rotationssymmetrie um den Ursprung:

$$\vec{f}(\vec{x}) = f_r(r)\vec{e}_r + f_\varphi(r)\vec{e}_\varphi . \quad (5.16)$$

Wählt man als Diffusionsmatrix die Einheitsmatrix (5.13), gilt $\vec{\alpha} = \vec{f}$ und wir können anhand von (4.26) - (4.28)

$$d \cdot \vec{\alpha}_\parallel = f_r(r)\vec{e}_r \quad \text{und} \quad \vec{\alpha}_\perp = f_\varphi(r)\vec{e}_\varphi \quad (5.17)$$

identifizieren.

Aus Relation (4.30), die für große N gültig ist, ergibt sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_s = e^{\frac{2N}{d} \int f_r(r) dr} . \quad (5.18)$$

Weiterhin ergibt sich aus (4.36)

$$\vec{j}_s = f_\varphi(r)p_s\vec{e}_\varphi , \quad (5.19)$$

d.h. \vec{j}_s verluft kreisformig um den Fixpunkt von \vec{f} , und die Radialkomponente verschwindet.
Fur die Rotation von \vec{j}_s ergibt sich dann

$$\left(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s\right)_z = \underbrace{\left(f'_\varphi(r) + \frac{f_\varphi(r)}{r}\right)}_{\vec{\nabla} \times \vec{f}} p_s(r) + \underbrace{f_\varphi(r) p'_s(r)}_{\vec{\nabla} p_s \times \vec{f}} \quad (5.20)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{r} \cdot f_\varphi(r) p_s(r)}_{\vec{\nabla} \times \vec{e}_j \cdot |\vec{j}_s|} + \underbrace{\left(f'_\varphi(r) p_s(r) + f_\varphi(r) p'_s(r)\right)}_{\vec{\nabla} |\vec{j}_s| \times \vec{e}_j} . \quad (5.21)$$

Hierbei beschreibt der erste Term einen zirkularen Wahrscheinlichkeitsfluss um den Fixpunkt; der zweite Term entspricht dem weniger intuitiven Beitrag, der durch die nderung des Betrags von \vec{j}_s zustande kommt. Am Ort des p_s -Maximums bleibt lediglich der erste Term ubrig und der Rotationssinn von \vec{j}_s ergibt sich allein aus dem Vorzeichen von f_φ .

Fur groe N konzentriert sich ein Groteil der Wahrscheinlichkeitsmasse auf einen Bereich in unmittelbarer Nahe des Fixpunkts und (5.20) lasst sich weiter vereinfachen, indem \vec{f} um den Fixpunkt linearisiert wird. Hierdurch wird aus (5.16)

$$\vec{f}(\vec{x}) = -\lambda r \cdot \vec{e}_r + \omega r \cdot \vec{e}_\varphi , \quad (5.22)$$

bzw. in kartesischen Koordinaten:

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} -\lambda x - \omega y \\ -\lambda y + \omega x \end{pmatrix} . \quad (5.23)$$

Die Eigenwerte der Jacobimatrix am Ort des Fixpunkts lauten dann $\{-\lambda - i\omega, -\lambda + i\omega\}$, d.h. der Fixpunkt ist eine stabile Spirale fur $\lambda > 0, \omega \neq 0$, wobei das Vorzeichen von ω den Rotationssinn der Spirale bestimmt. Fur $\omega = 0$ stellt der Fixpunkt einen stabilen Knoten dar.

Weiterhin erhalten wir

$$\vec{\nabla} \times \vec{f} = 2\omega \quad (5.24)$$

und mithilfe von (5.18) (siehe Abb. 5.1(a)),

$$p_s(\vec{x}) = A \exp\left(-\frac{\lambda N}{d}(x^2 + y^2)\right) . \quad (5.25)$$

Die stationare Wahrscheinlichkeitsstromdichte (5.19) lautet dann (siehe Abb. 5.1 (b)):

$$\vec{j}_s(\vec{x}) = p_s \begin{pmatrix} -\omega y \\ \omega x \end{pmatrix} , \quad (5.26)$$

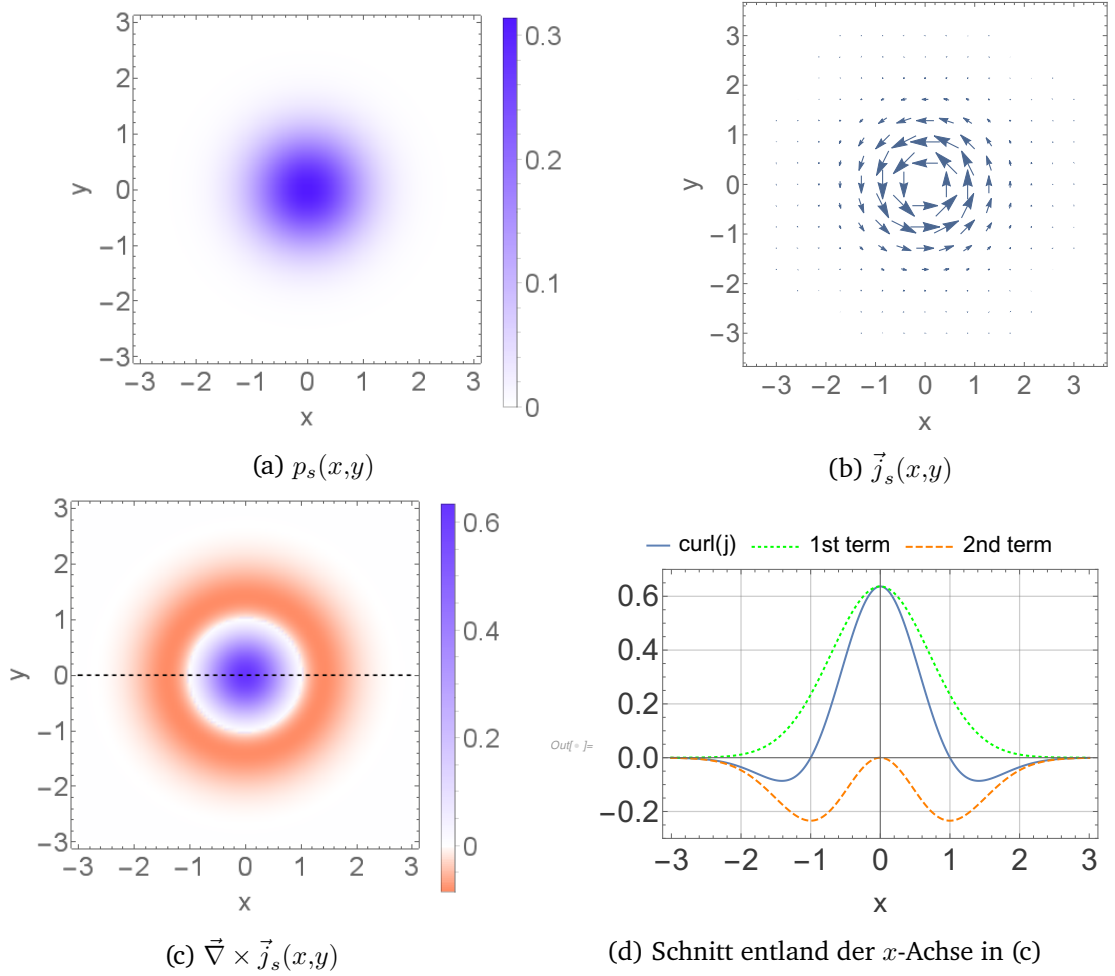


Abbildung 5.1 Numerische Ergebnisse zum Beispielsystem (5.23) für die Parameterwerte $\omega = \lambda = d = N = 1$:

- (a) Stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte $p_s(x, y)$
- (b) Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}_s(x, y)$
- (c) Rotation der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte $|\vec{\nabla} \times \vec{j}_s(x, y)|$ (da alle Vektoren entlang der positiven z -Achse zeigen, ist hier lediglich der Betrag dargestellt)
- (d) Schnitt entlang der x -Achse in (c)

woraus sich

$$\begin{aligned}
 \left(\vec{\nabla} \times \vec{j}_s(\vec{x}) \right)_z &= 2\omega p_s + -\frac{\omega \lambda N}{d} p_s (x^2 + y^2) \\
 &= \frac{\omega \lambda N}{d} p_s \left(\frac{2d}{\lambda N} - (x^2 + y^2) \right)
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

ergibt. Wählt man nun $\omega > 0$ ist die Rotation von \vec{j}_s innerhalb eines Kreises mit Radius $r = \sqrt{\frac{2d}{\lambda N}}$ um den Ursprung positiv, wobei der erste Term, der den Rotationssinn von \vec{j}_s angibt, dominiert. Außerhalb dieses Kreises kehrt sich der Rotationsinn ins Negative (siehe Abb. 5.1 (c) und (d)).

5.3 Vorhersage der Topologie von \vec{j}_s

Ziel von Kapitel 5 soll die Entwicklung einer einfachen Vorhersagemethode für die Topologie von \vec{j}_s sein, die ohne ein Lösen der Fokker-Planck-Gleichung auskommt. Um dieses Ziel zu erreichen, haben wir bereits Lage und Art der Fixpunkte von \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ bestimmt sowie eine Abschätzung des Rotationssinns von \vec{j}_s um diese Fixpunkte hergeleitet. Wie wir im Folgenden sehen werden, reichen diese beiden Informationen für viele Systeme bereits aus, um ein recht detailliertes Bild von der Topologie von \vec{j}_s zu erhalten.

Hierbei wollen wir zunächst den Nutzen unserer Vorhersagemethode sowie die Grenzen der zugrunde liegenden ($N \gg 1$)-Näherung an ausgewählten, künstlichen Modellen überprüfen, bei denen lediglich einige der einfachsten Kopplungsterme zwischen den beiden chemischen Spezies existieren, bevor wir zu realistischen Reaktionssystemen übergehen.

Jedes zweidimensionale, ungekoppelte Reaktionssystem lässt sich in der Form

$$\vec{f}^u = \begin{pmatrix} f_1^u(x) \\ f_2^u(y) \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

und

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{11}(x) & 0 \\ 0 & D_{22}(y) \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

schreiben.

Würden wir nun realistische Kopplungsreaktionen in dieses System einfügen, ergäben sich im Allgemeinen zusätzliche Kopplungsterme sowohl im Drift- als auch im Diffusionsterm. Der Einfachheit halber wollen wir jedoch zuerst den Effekt eines einzelnen, isolierten Kopplungsterms analysieren. Wir betrachten daher nun zunächst künstliche Modelle in denen nur in einer der beiden Kenngrößen (Drift oder Diffusion) zusätzliche Kopplungsterme enthalten sind.

5.4 Auswirkungen einzelner Reaktionsterme

5.4.1 \vec{j}_s für Kopplungsterme in der deterministischen Drift

Obwohl es etliche verschiedene Möglichkeiten gibt, um Kopplungsterme in die deterministische Drift (5.28) einzuführen, lassen sich nicht alle erdenklichen Terme auch durch chemische Reaktionsgleichungen beschreiben. So lässt sich beispielsweise eine positiv lineare Kopplung der Form $f_1(x, y) = f_1^u(x) + ay$ anhand der Kopplungsreaktion $Y \xrightarrow{a} X + Y$ erzeugen. Negative lineare Kopplungsterme der Form $f_1(x, y) = f_1^u(x) - ay$ können jedoch nicht auftreten, da sonst negative Teilchenkonzentrationen in X möglich sein müssten.

Unter Berücksichtigung derartiger Einschränkungen lautet die allgemeinste Form der deterministischen Drift für ein gekoppeltes Zwei-Spezies-Reaktionssystem mit maximal bimolekularen Reaktionen und unter Annahme des Massenwirkungsgesetzes:

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} f_1^u(x) + a_1y + b_1xy + c_1y^2 \\ f_2^u(y) + a_2x + b_2xy + c_2x^2 \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

mit $a_i, c_i > 0$ und $b_i \in \mathbb{R}$. Die Kopplungsterme sind hierbei voneinander unabhängig, da sich für jeden dieser Terme eine chemische Reaktion konstruieren lässt, die die deterministische Drift ansonsten unverändert lässt.

Aus (5.29) und (5.30) ergibt sich der folgende explizite Ausdruck für (5.10) am Ort eines p_s -Extremum:

$$\left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{j}_s \right)_z = \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{f} \right)_z \quad (5.31)$$

oder in anderen Worten

$$\frac{\partial_x j_y}{D_{22}} - \frac{\partial_y j_x}{D_{11}} = \frac{\partial_x f_y}{D_{22}} - \frac{\partial_y f_x}{D_{11}}. \quad (5.32)$$

Unglücklicherweise lässt sich das Vorzeichen von $\vec{\nabla} \times \vec{j}_s$ am Ort des betrachteten p_s -Extremums aus diesem Ausdruck nicht mit Sicherheit ableiten.

Wir beschränken uns daher erneut auf den Fall

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}, \quad (5.33)$$

für den wir die Nenner in (5.32) wegekürzen können, sodass $\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = \vec{\nabla} \times \vec{f}$ folgt.

Setzt man diesen Ausdruck gleich null, ergibt sich eine implizite Gleichung für die Grenzkurve zwischen den beiden Regionen mit unterschiedlichem Vorzeichen der Rotation von \vec{j}_s , bzw. \vec{f} . Im Folgenden wollen wir diese Kurve nutzen, um den Rotationsinn von \vec{j}_s um den Fixpunkt abzuschätzen. Da sowohl x als auch y nur linear in dieser Gleichung auftreten, muss die Grenzkurve eine Gerade sein. Für $c_1 \neq b_2$ können wir diese explizit angeben:

$$y = \frac{2c_2 - b_1}{2c_1 - b_2} x + \frac{a_2 - a_1}{2c_1 - b_2}. \quad (5.34)$$

Abhängig von den Parametern des Systems kann der Abstand dieser Grenzlinie zum p_s -Maximum größer oder kleiner sein.

Anstatt uns in (5.32) auf eine konstante, isotrope Diffusion einzuschränken, hätten wir in führender Ordnung in $1/N$ alternativ auch (5.12) nutzen können. Beim vorliegenden System ist es jedoch unmöglich einen allgemeinen analytischen Ausdruck für $\vec{\alpha}_\perp$ anzugeben, sodass die Einschränkung auf $\mathbf{D} = d \cdot \mathbf{Id}$, die wir hier vorgenommen haben, zu anschaulicheren Ergebnissen führt.

Abb. 5.2 zeigt anhand verschiedener Beispielsysteme den vorhergesagten Rotationssinn von \vec{j}_s nach (5.31) (dargestellt als grüne (positiv) bzw. rote (negativ) Hintergrundfarbe) sowie die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ und vergleicht diese Vorhersagen mit den tatsächlichen Verläufen von \vec{j}_s , die durch numerisches Lösen der Fokker-Planck-Gleichung bestimmt wurden. In dieser Abbildung haben wir

$$\vec{f}^u = \begin{pmatrix} r_1 - s_1 x \\ r_2 - s_2 y \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

als zugrunde liegendes ungekoppeltes System genutzt, zusammen mit der konstanten, isotropen Diffusionsmatrix (5.33).

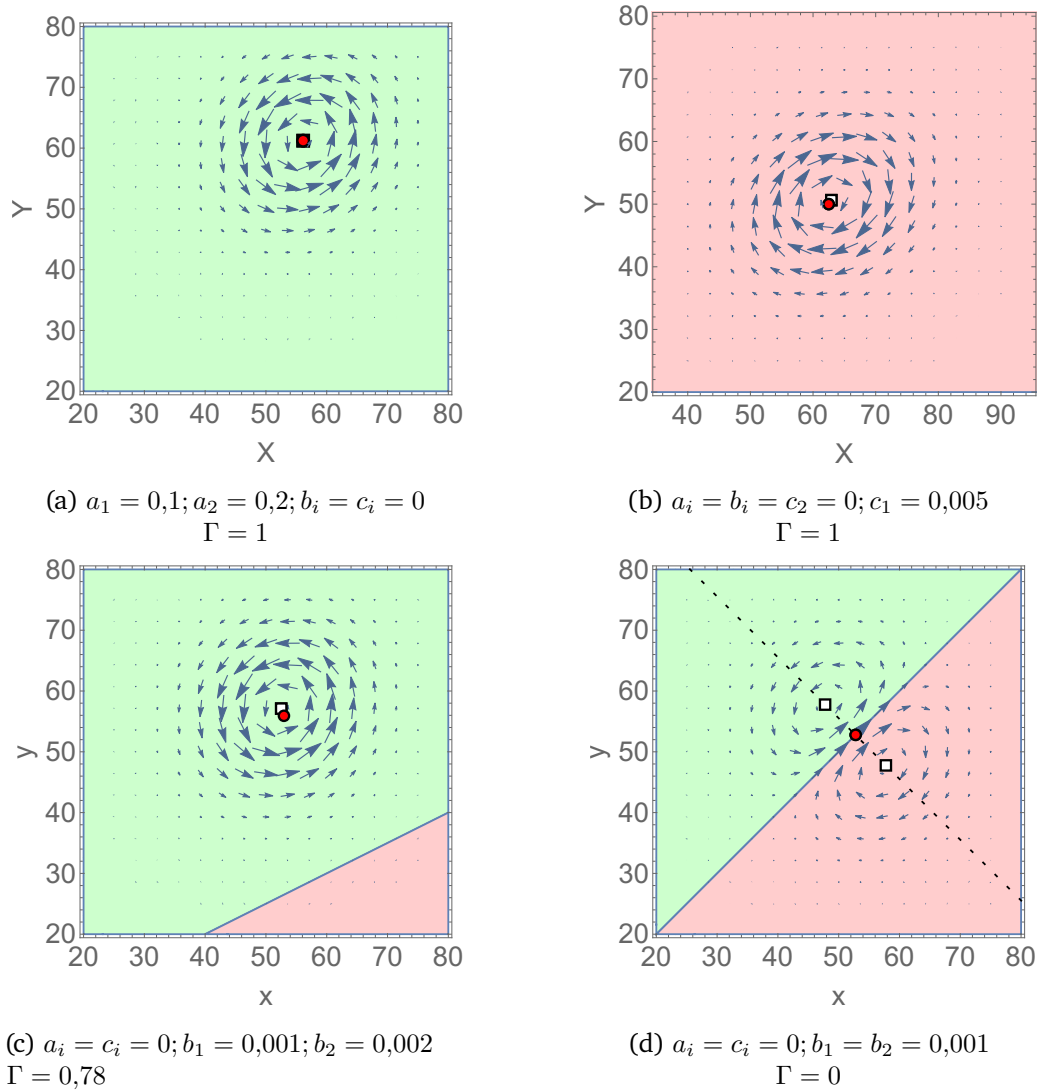


Abbildung 5.2 Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s (blau) für das gekoppelte System (5.30) mit (5.35), (5.33) und die Parameter $r_1 = r_2 = 50; s_1 = s_2 = 1; d = 100; N = 1$ mit verschiedenen Kopplungsstärken. Die grüne (rote) Hintergrundfarbe markiert Bereiche mit positiv (negativ) vorhergesagtem Rotationssinn nach Gleichung (5.31). Rote Punkte markieren die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$, weiße Quadrate die Fixpunkte von \vec{j}_s . In (a) und (b) wird jeweils eine Güte von $\Gamma = 1$ erreicht, da (5.31) keinen Nulldurchgang aufweist. In (d) ist $\Gamma = 0$, da der Fixpunkt exakt auf der Grenzlinie liegt.

Wie aus Abb. 5.2 zu entnehmen ist, stimmen die Fixpunkte von \vec{j}_s und $\vec{\alpha}$ umso besser überein, je weiter der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt von der Grenzlinie zwischen positivem und negativem Rotationssinn entfernt ist. Dies entspricht auch unseren Erwartungen gemäß Abschnitt 4.7. Berechnet man die dort definierte Güte Γ , die in den Bildunterschriften von Abb. 5.2

mit angegeben ist, ergibt sich in (a) und (b) zunächst eine perfekte Güte von $\Gamma = 1$, da (5.31) für alle \vec{x} positiv (negativ) ist und somit der Abstand zur Grenzlinie zwischen positivem und negativem Rotationssinn, der in die Berechnung von Γ eingeht, unendlich groß ist. In Abb. 5.2 (c) ist eine solche Grenzlinie vorhanden und die Güte der Näherung verringert sich auf $\Gamma = 0,78$, während die $1/N$ -Näherung in Abb. 5.2 (d) vollständig zusammenbricht ($\Gamma = 0$), da der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt nun exakt auf der Grenzlinie liegt und somit keine direkte Entsprechung mehr in \vec{j}_s gefunden werden kann. Anstelle eines einzelnen Fixpunkts entsteht dort nun ein Dipolstrom. Obwohl eine Vorhersage der \vec{j}_s -Topologie anhand der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte und des Rotationssinns nun nicht mehr direkt möglich ist, fällt auf, dass sich auch diese Dipolströme an den vorhergesagten Rotationssinn zu halten scheinen. Wir werden Entstehung und Eigenschaften dieser Dipolströme im folgenden Abschnitt noch einmal im Detail analysieren.

Während die Abweichung zwischen den $\vec{\alpha}$ - und \vec{j}_s -Fixpunkten in Abb. 5.2(d) offensichtlich ist, befindet sich hier auch das p_s -Maximum nicht mehr am Ort des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts. Diese Abweichung ist jedoch äußerst gering und ließe sich im Maßstab der vorliegenden Abbildung praktisch nicht erkennen. Aus Symmetriegründen müssen beide Punkte zudem exakt auf der $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} = 0$ -Grenzlinie liegen.

Bereits anhand dieses einfachen Beispiels lässt sich ausmachen, dass die Abschätzung der Topologie von \vec{j}_s anhand der Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ sowie des vorhergesagten Rotationssinns zumindest für die Fälle mit $\Gamma \approx 1$ problemlos möglich zu sein scheint. Für diese Fälle ist ein Lösen der Fokker-Planck-Gleichung und eine explizite Berechnung von \vec{j}_s nur dann nötig, wenn man sich für detaillierte Eigenschaften der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte interessiert, wie beispielsweise die elliptische Deformation des zirkulären Wahrscheinlichkeitsflusses um den Fixpunkt.

Wir erkennen allerdings ebenso bereits einen Nachteil dieser Methode: Während wir Rotationssinn und Fixpunkte von \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ ohne Probleme angeben können, haben wir auch hier wieder keinerlei Informationen über die Stärke der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte. So hätten wir beispielsweise unmöglich im Voraus wissen können, wie klein der Betrag von \vec{j}_s im Bereich mit negativem Rotationssinn in Abb. 5.2 (c) ist.

5.4.2 Terme höherer Ordnung erzeugen Dipol-Ströme

In Abschnitt 4.7 haben wir bereits gesehen, dass die $1/N$ -Näherung zusammenbricht, wenn $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha}$ sehr klein wird. Dies ist in der Umgebung der Grenzlinien zwischen positivem und negativem Rotationssinn der Fall. In diesen Bereichen verschwindet der führende Term der $1/N$ -Entwicklung und höhere Terme müssen zur Beschreibung von \vec{j}_s herangezogen werden. Wie aus dem Beispielsystem im vorherigen Abschnitt hervorgeht, sind solche höheren Terme mit Dipolströmen assoziiert. Diese Form ist zudem – wie wir schon bald anhand weiterer Beispiele sehen werden – nicht spezifisch für das obige Beispielsystem, sondern tritt ganz allgemein auf.

Dies ist auch allein schon dadurch plausibel, dass der Dipol den einfachsten Verlauf von Stromlinien darstellt, bei dem die Rotation entlang einer Geraden verschwindet. Dennoch wollen wir uns dies auch noch einmal anhand eines Rechenbeispiels verdeutlichen. Hierzu

gehen wir von einem einzelnen, stabilen \vec{f} -Fixpunkt am Ursprung aus. Da wir uns für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte in der Nähe dieses Fixpunkts interessieren, wählen wir einen Ansatz, der linear in x und y ist:

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \end{pmatrix}. \quad (5.36)$$

Für die Diffusionsmatrix wählen wir die einfachst mögliche Form, die zu einem nicht-verschwindendem stationären Wahrscheinlichkeitsstrom führt,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & d+x \end{pmatrix}. \quad (5.37)$$

Für dieses einfache Modell gilt $\vec{\alpha} = \vec{f}$ und

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} = -\frac{y}{(d+x)^2} \vec{e}_z, \quad (5.38)$$

was am Ursprung genau verschwindet.

Wir raten nun die folgende Form für die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte am Ursprung (also für kleine x und y):

$$p_s = A(d-x) \exp\left(-\frac{N}{d}(x^2 + y^2)\right), \quad (5.39)$$

was sich in der Tat als stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung in führender Ordnung in x und y herausstellt:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-xp_s - \frac{d}{2N} \frac{\partial p_s}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(-yp_s - \frac{d-x}{2N} \frac{\partial p_s}{\partial y} \right) \\ &= A \left(-\frac{d}{2N} \frac{\partial}{\partial x} - x \right) e^{-\frac{N}{d}(x^2+y^2)} + \mathcal{O}(x^2, y^2) \\ &= 0 + \mathcal{O}(x^2, y^2). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Somit lässt sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte in der Nähe des \vec{f} -Fixpunkts annähern als

$$\vec{j}_s = \begin{pmatrix} -xp - \frac{d}{2N} \frac{\partial p}{\partial x} \\ -yp - \frac{d-x}{2N} \frac{\partial p}{\partial y} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \frac{dA}{2N} \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(x, y). \quad (5.41)$$

Dieser konstante Vektor in x -Richtung stellt den führenden Term eines Dipolfeldes dar, das in x -Richtung zeigt.

Alternativ lässt sich die Tatsache, dass ein solches Dipolfeld entsteht, auch direkt anhand des Ansatzes (5.39) sehen, der in führender Ordnung die Summe zweier identischer Gaußfunktionen darstellt, die im Abstand $1/d$ zueinander angeordnet sind.

5.4.3 \vec{j}_s für Kopplungsterme in der Diffusionsmatrix

Als nächstes wollen wir Modelle betrachten, bei denen einzelne Kopplungsterme in die Diffusionsmatrix eingebracht werden. Hierbei wollen wir erneut keine realistischen Kopplungsreaktionen untersuchen, sondern den Effekt einzelner Kopplungsterme innerhalb der Diffusionsmatrix studieren. Wir gehen also von einem vollständig ungekoppelten Driftvektor gemäß (5.28) aus.

Die allgemeine ungekoppelte Diffusionsmatrix (5.29) erlaubt grundsätzlich zwei Arten der Kopplung: Entweder lässt sich in die Diagonalelemente $D_{ii}(x_i)$ eine Abhängigkeit zur jeweils anderen Spezies X_j integrieren oder die Außerdiagonalelemente $D_{12} = D_{21}$ werden auf von Null verschiedene Werte gesetzt.

Genau wie die Kopplungsterme innerhalb der deterministischen Drift, lassen sich auch die Kopplungen innerhalb der Diffusionsmatrix nicht völlig beliebig wählen, sondern unterliegen gewissen Einschränkungen, wenn man die Gültigkeit des Massenwirkungsgesetzes einfordert. Hierbei müssen insbesondere alle Kopplungsterme auf der Diagonalen von \mathbf{D} stets positiv gewählt werden, da die Hinzunahme weiterer chemischer Reaktionen niemals zu einer Verringerung des Rauschens führen kann. Im Gegensatz dazu können die Außerdiagonalterme grundsätzlich beide Vorzeichen aufweisen, mit Ausnahme des konstanten Terms, der stets positiv ist.

Alles in allem erhalten wir die folgenden allgemeinen gekoppelten Diffusionsmatrixelemente:

$$\begin{aligned} D_{11}(x,y) &= D_{11}^u(x) + a_1 y + b_1 x y + c_1 y^2 \\ D_{22}(x,y) &= D_{22}^u(y) + a_2 x + b_2 x y + c_2 x^2 \\ D_{12}(x,y) &= D_{21} c(x,y) = e \pm f_1 x \pm f_2 y \\ &\quad \pm g x y \pm h_1 x^2 \pm h_2 y^2 \end{aligned} \quad (5.42)$$

(mit positiven Reaktionskonstanten) für zwei-Spezies Reaktionssysteme mit maximal bimolekularen Reaktionen unter Annahme des Massenwirkungsgesetzes.

Wir wollen uns hier jedoch zunächst auf ein vereinfachtes Beispiel konzentrieren, bei dem lediglich lineare, diagonale Kopplungsterme auftreten:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{11}^u(x) + a_1 y & 0 \\ 0 & D_{22}^u(y) + a_2 x \end{pmatrix}. \quad (5.43)$$

Hieraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} &= \frac{a_1(-2f_1(x) - D_{11}'^u(x))}{2(a_1 y + D_{11}^u(x))^2} \\ &\quad - \frac{a_2(-2f_2(y) - D_{22}'^u(y))}{2(a_2 x + D_{22}^u(y))^2} \\ &= \alpha_1(x) a_1 \eta_1^2(x, y) - \alpha_2(y) a_2 \eta_2^2(x, y), \end{aligned} \quad (5.44)$$

mit der Abkürzung $1/\eta_i = (a_i x_j + D_{ii}^u(x_i))$ und dem Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$.

Am Ort des Fixpunkts von $\vec{\alpha}$ ist diese Größe null. Somit verschwindet dort der führende Term in $1/N$ und wir erwarten eine stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte mit Dipolcharakter.

Diese Vorhersage lässt sich leicht anhand von Abb. 5.3 prüfen, wo das Vorzeichen von (5.44) zusammen mit dem tatsächlichen Verlauf von \vec{j}_s gemäß der Fokker-Planck-Gleichung dargestellt ist.

Für dieses Beispielsystem haben wir (5.35) für den Driftvektor sowie $\mathbf{D}^u = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$ für die zugrunde liegende ungekoppelte Diffusionsmatrix angesetzt.

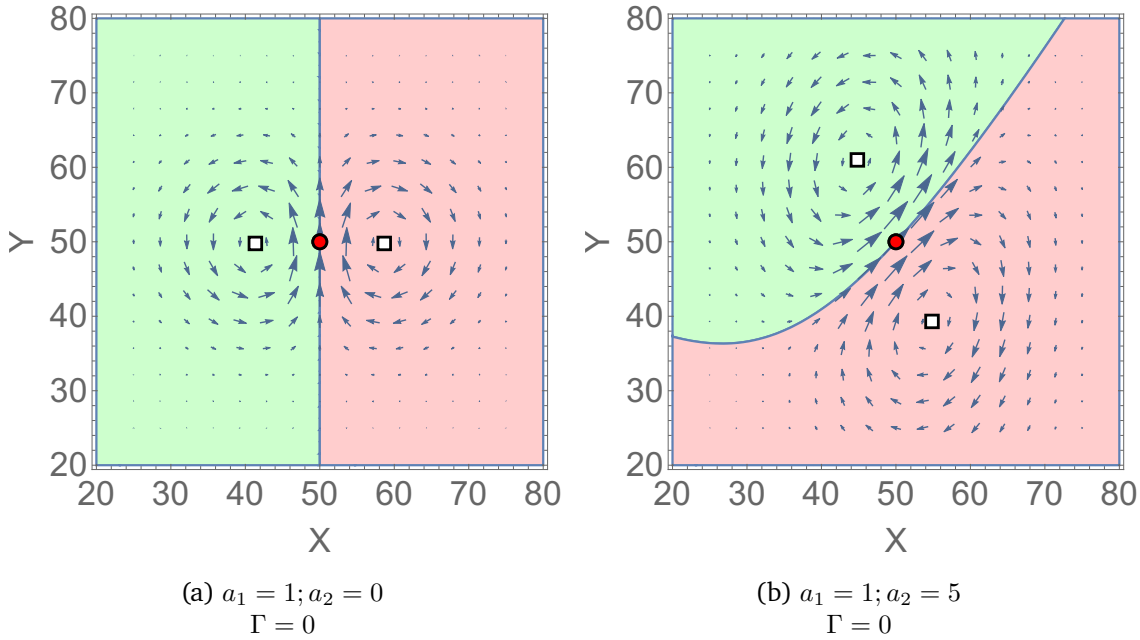


Abbildung 5.3 Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s (blau) für das Beispielsystem (5.35), mit linear gekoppelter Diffusion (5.43) mit $D_{11}^u(x) = D_{22}^u(y) = d = 100$ und den Parametern $r_1 = r_2 = 50$, $s_1 = s_2 = 1$, $d = 100$, $N = 1$ bei verschiedenen Kopplungsstärken. Die grüne (rote) Hintergrundfarbe markiert Bereiche mit positiv (negativ) vorhergesagtem Rotationssinn nach Gleichung (5.31). Rote Punkte markieren die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$, weiße Quadrate die Fixpunkte von \vec{j}_s . Die Güte der \vec{j}_s -Näherung beträgt jeweils $\Gamma = 0$, da beide Fixpunkte genau auf der Grenzlinie liegen.

Aufgrund der Tatsache, dass alle Terme in (5.44) proportional zu einer Komponente von $\vec{\alpha}$ sind, führt diese Art der Kopplung unabhängig vom gewählten Driftvektor und den gewählten Kopplungs- und Diffusionsstärken stets zur Ausbildung von Dipolströmen.

5.4.4 Allgemeine Bedingungen für das Entstehen von Dipolströmen

Wir wissen bereits, dass der führende Term in $1/N$ verschwindet – und somit Terme höherer Ordnung wichtig werden – wenn $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha}$ am Ort eines α -Fixpunkt verschwindet. Wir können leicht feststellen, für welche Arten von Reaktionsnetzwerken dies der Fall ist. Hierzu schreiben wir

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} = & \left(\alpha_1 \frac{\partial B_{12}}{\partial x} + B_{12} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + B_{22} \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial B_{22}}{\partial x} \right) \\ & - \left(\alpha_1 \frac{\partial B_{11}}{\partial y} + B_{11} \frac{\partial \alpha_1}{\partial y} + B_{12} \frac{\partial \alpha_2}{\partial y} + \alpha_2 \frac{\partial B_{12}}{\partial y} \right) .\end{aligned}\quad (5.45)$$

mit der Abkürzung $B = D^{-1}$, d.h. $B_{12} = B_{21} = -\frac{D_{12}}{\Delta}$, $B_{11} = \frac{D_{22}}{\Delta}$, $B_{22} = \frac{D_{11}}{\Delta}$ mit $\Delta = \det(\mathbf{D}) = D_{11}D_{22} - D_{12}^2$.

Am Ort eines $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt verschwindet die Hälfte dieser Terme und wir erhalten

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha}(\vec{x}_0) = & B_{12} \left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x} - \frac{\partial \alpha_2}{\partial y} \right) \\ & + \left(B_{22} \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - B_{11} \frac{\partial \alpha_1}{\partial y} \right) .\end{aligned}\quad (5.46)$$

Immer wenn diese Größe verschwindet, verschwindet der führende Term in $1/N$ und Terme höherer Ordnung müssen berücksichtigt werden.

Dies passiert beispielsweise dann, wenn das System gewisse Symmetrien aufweist: Immer wenn eine $x \leftrightarrow y$ - Symmetrie in $\vec{\alpha}$ vorhanden ist, trägt der erste Term in (5.46) nicht bei. Weiterhin verschwindet dieser Term auch in Systemen, bei denen die Außerdiagonalelemente $D_{12} = D_{21}$ der Diffusionsmatrix null sind. Der zweite Term hingegen ist null, wenn die Parameter des Systems so gewählt werden, dass die Symmetriebedingung $D_{11} \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} = D_{22} \frac{\partial \alpha_1}{\partial y}$ am Ort des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts erfüllt ist, jedoch auch wenn der Driftvektor komplett ungekoppelt ist, also $\frac{\partial \alpha_2}{\partial x} = \frac{\partial \alpha_1}{\partial y} = 0$ erfüllt wird.

Dies bedeutet, dass der führende Term in $1/N$ in Systemen mit ungekoppeltem Drift und verschwindenden Außerdiagonalelementen in der Diffusionsmatrix immer verschwindet, sodass das System unabhängig von der Wahl der Parameter stationäre Wahrscheinlichkeitsdichten mit Dipolcharakter (oder Multipolen höherer Ordnung) ausbilden wird. Das Beispielsystem in Abb. 5.3 fällt genau in diese Kategorie.

5.5 Die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte in realistischen Reaktionssystemen

Nachdem wir die Auswirkungen einzelner, isolierter Kopplungsterme innerhalb von Drift und Diffusion auf die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte ausgiebig untersucht haben, wenden wir uns nun den realistischen Kopplungsreaktionen zu. Wie bereits erwähnt, werden durch solche Reaktionen im Allgemeinen Kopplungsterme an mehreren Stellen in Drift und Diffusion gleichzeitig induziert. Beispielsweise erzeugt die Reaktion



einen Term $-kx$ in $f_1(\vec{x})$, $+kx$ in $f_2(\vec{x})$ und $+kx$ in $D_{11}(\vec{x})$ und $D_{22}(\vec{x})$.

Im Folgenden wollen wir uns zunächst noch einmal dem stochastischen Rosenzweig-MacArthur-Modell aus Abschnitt 4.10 zuwenden und untersuchen, welche stationären Wahrscheinlichkeitsströme im System mit und ohne Grenzzyklus entstehen. Hierbei wollen wir auch klären, wie sich das Auftreten langsamer transients Zustände mit der \vec{j}_s -Näherung aus Abschnitt 4.6 in Einklang bringen lässt. Anschließend betrachten wir mit der positiven Feedbackschleife noch ein weiteres Beispiel, bei dem stationäre Wahrscheinlichkeitsströme auftreten können. Im Gegensatz zu den bisherigen Beispielsystemen handelt es sich hierbei um ein multistabiles System, innerhalb dessen ein weiteres Phänomen zutage tritt, bei dem die einfache \vec{j}_s -Näherung in erster Ordnung in $1/N$ nicht mehr ausreichend ist.

5.5.1 \vec{j}_s im Rosenzweig-MacArthur-Modell

Als erstes realistisches Beispiel, an dem wir die entstehenden stationären Wahrscheinlichkeitsströme untersuchen wollen, betrachten wir noch einmal das stochastische Rosenzweig-MacArthur-Modell (4.52). Hierbei nutzen wir wieder die beiden Parametersätze aus Abschnitt 4.10, die einmal zu einer stabilen Spirale und einmal zu einer instabilen Spirale, umgeben von einem stabilen Grenzzyklus, führen.

Wertet man (5.10) für dieses System aus, ergibt sich für beide Parametersätze ein weiterer Bereich positiven Rotationssinns, der deutlich über die Umgebung des Fixpunkts bzw. des Grenzzyklus hinaus geht. Somit erwarten wir in beiden Fällen einen zirkulären Wahrscheinlichkeitsfluss um den jeweiligen Fixpunkt.

Die numerischen Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung für beide Parametersätze sind in Abb. 5.4 dargestellt. Im Gegensatz zu den stochastischen Phasenportraits in Abschnitt 4.10 entsprechen die Vektorpfeile hier nun der Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s , während das Konvektionsfeld $\vec{\alpha}$ nicht mit dargestellt ist.

Wie man sofort sieht, ergibt sich für beide Parametersätze der erwartete zirkuläre Wahrscheinlichkeitsfluss entgegen dem Uhrzeigersinn.

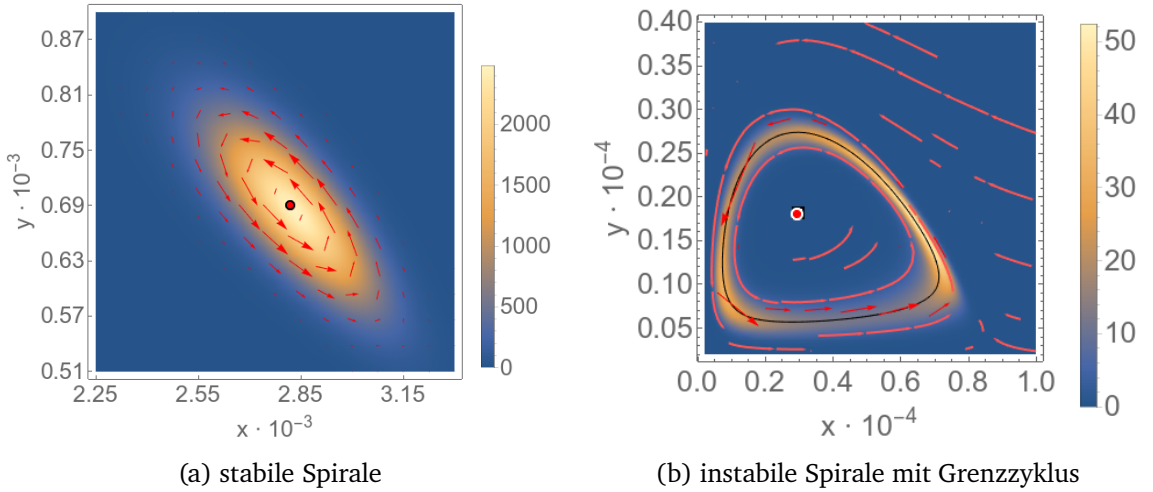


Abbildung 5.4 Stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte (Dichtehistogramm in blau/gelb) und Wahrscheinlichkeitsstromdichte (Vektor- / Stromlinienplot in rot) für das System (4.52) mit verschiedenen Parametersätzen:

(a) $A = 2/3; \beta = 0,8; d = 0,65; c = 0,65; b = 1; \delta = 0,2; q = 0,01; \Omega = 1000$

(b) $A = 2/3; \beta = 0,9; d = 0,65; c = 0,65; b = 1; \delta = 0,1; q = 0,01; \Omega = 1000$

Die dunkleren roten Vektoren in (b) zeigen Richtung und Stärke des Vektorfeld \vec{j} , wohingegen die helleren roten Stromlinien nur die Richtung angeben, an Orten, an denen die Stärke des Vektorfelds zu gering für die übliche Darstellung ist. Rote Punkte markieren die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$, das weiße Rechteck in (b) zeigt das Minimum der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte p_s , die schwarze Linie den Verlauf des Grenzzyklus in $\vec{\alpha}$.

5.5.2 Langsame transiente Zustände

In Abschnitt 4.10.5 haben wir bereits festgestellt, dass das Auftreten langsamer transients Zustände eigentlich im Widerspruch zu den Ergebnissen aus Abschnitt 4.6 steht, wo wir in führender Ordnung in $1/N$ ermitteln konnten, dass \vec{j}_s den Höhenlinien von p_s folgt. Der Grund für diesen Widerspruch ist, dass sich die Resultate aus Abschnitt 4.6 nur bedingt auf Grenzzyklen anwenden lassen, da die Lösung (4.30) für die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte in diesem Fall nicht wohldefiniert ist. Dies liegt daran, dass $\vec{\alpha}_{||}$ hier in radialer Richtung zeigt (wenn man das Minimum der Wahrscheinlichkeitsdichte als Koordinatenursprung wählt), was zu einem Ring von Fixpunkten und letztlich zu einem Ring von ungekoppelten, eindimensionalen dynamischen Systemen führt. Das Integral im Exponenten von (4.30) ist daher nicht wohldefiniert und bräuchte eine andere Integrationskonstante für jeden möglichen Winkel. Dies bedeutet, dass sich p_s im Fall eines Grenzzyklus nicht allein anhand von $\vec{\alpha}_{||}$ festlegen lässt.

Um dies explizit zu sehen, wollen wir noch einmal das rotationssymmetrische Beispiel (5.16) betrachten und die Modifikation

$$\begin{aligned} f_r(r) &= ar - br^3 \\ f_\varphi(r, \varphi) &= (\omega + \epsilon \cos(\varphi))r, \end{aligned} \quad (5.48)$$

mit $a, b, \epsilon > 0$ und $\omega > \epsilon$ vornehmen.

Dieses Beispiel besitzt einen stabilen Grenzyklus bei $r = \sqrt{a/b}$, auf dem die Dynamik je nach Winkelposition φ langsamer oder schneller wird.

Da f_φ nun von φ abhängt, ist es nicht mehr rotationssymmetrisch. Nichtsdestotrotz ist (5.17) nach wie vor gültig, genauso wie (5.18) für die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte, woraus sich

$$p_s(\vec{x}) = A \exp \left(\frac{N}{d} \left(ar^2 - \frac{1}{2} br^4 \right) \right) \quad (5.49)$$

ergibt.

Dieser Ausdruck besitzt wie erwartet ein Maximum bei $r = \sqrt{a/b}$. Da p_s nun jedoch nicht mehr von φ abhängt, entkoppelt diese Lösung für verschiedene Richtungen von φ , wobei jede Richtung ein anderes A benötigen würde. Diese Entkopplung kann nur daran liegen, dass die Näherung für große N , laut der p_s nur von $\vec{\alpha}_\parallel$ abhängt, hier nicht mehr gültig ist. Um diese unabhängigen Lösungen miteinander in Verbindung zu bringen, muss nun also der Einfluss von $\vec{\alpha}_\perp$ explizit berücksichtigt werden, woraus die Winkelabhängigkeit von $A = A(\varphi)$ folgt. Hierzu geht man am besten von der Stationaritätsbedingung (4.33) aus.

Diese schreiben wir in der folgenden Form, bei der für jede der beiden $\vec{\alpha}$ -Komponenten nur noch die führenden Terme in $1/N$, also Terme der Ordnung N bei $\vec{\alpha}_\parallel$ und Terme der Ordnung 1 bei $\vec{\alpha}_\perp$, berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned} 0 &= \mathbf{D}\vec{\alpha}_\parallel \cdot \vec{\nabla} p_s - \frac{1}{2N} \vec{\nabla} (\mathbf{D}\vec{\nabla} p_s) \\ &+ (\vec{\nabla} \cdot \vec{\alpha}_\perp) p_s + \vec{\alpha}_\perp \cdot \vec{\nabla} p_s. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Die Terme in der ersten Zeile sind in $\mathcal{O}(N)$, die in der zweiten Zeile in $\mathcal{O}(1)$. Wenn wir $\vec{\alpha}_\perp = f_\varphi \vec{e}_\varphi$ entlang des Kraters von p_s finden wollen, können wir diese nicht wie zuvor vernachlässigen, sondern müssen sie nun ebenfalls berücksichtigen. Im Gegensatz zu Systemen mit isolierten Fixpunkten fällt p_s nicht proportional zu N in allen Richtungen ab, sondern variiert mit einer Steigung in $\mathcal{O}(1)$ in tangentialer Richtung. Diese Abhängigkeit lässt sich aus der letzten Zeile von (5.50) ermitteln:

$$\begin{aligned} 0 &= (\vec{\nabla} \cdot \vec{\alpha}_\perp) p_s + \vec{\alpha}_\perp \cdot \vec{\nabla} p_s \\ &= -\epsilon \sin \varphi \cdot p_s + A'(\varphi)/A p_s (\omega + \epsilon \cos \varphi) \\ &\Rightarrow A(\varphi) \propto 1/(\omega + \epsilon \cos(\varphi)). \end{aligned} \quad (5.51)$$

Dies bedeutet, dass p_s ein Maximum bei $\varphi = \pi$ sowie einen Sattel bei $\varphi = 0$ ausbildet.

5.5.3 \vec{j}_s bei der positiven Feedbackscheife

Positive Feedbackschleifen treten beispielsweise bei der Genexpression auf, wenn ein Protein, das aus einem bestimmten Gen hergestellt wird, die Expression eines zweiten Gens aktiviert und umgekehrt [67].

Eine Möglichkeit, diese zu Implementieren, lautet [66]



mit der Hillfunktion [68]

$$F_y(x) = \frac{x^{n_x} \cdot m_y}{x^{n_x} + \theta_x^{n_x}}, \tag{5.53}$$

die die kooperative Bindung zwischen Gen und Protein modelliert.

Da die Hillfunktion eine nicht-konstante Reaktionsrate darstellt, gehorcht auch dieses Modell – ebenso wie das Rosenzweig-MacArthur-Modell – nicht dem Massenwirkungsgesetz. Auch die Hillfunktion lässt sich jedoch als eine Zusammenfassung mehrerer einfacherer Reaktionen auffassen, die jeweils dem Massenwirkungsgesetz gehorchen [62].

Aus (5.52) ergibt sich der Driftvektor

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} -d_x x + b_x N + \frac{m_y y^{n_y} N}{y^{n_y} + (\theta_y N)^{n_y}} \\ -d_y y + b_y N + \frac{m_x x^{n_x} N}{x^{n_x} + (\theta_x N)^{n_x}} \end{pmatrix} \tag{5.54}$$

und die Diffusionsmatrix

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_x x + b_x N + \frac{m_y y^{n_y} N}{y^{n_y} + (\theta_y N)^{n_y}} & 0 \\ 0 & d_y y + b_y N + \frac{m_x x^{n_x} N}{x^{n_x} + (\theta_x N)^{n_x}} \end{pmatrix} \tag{5.55}$$

sowie

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} -d_x \left(\frac{1}{2N} + x \right) + b_x N + \frac{m_y y^{n_y} N}{y^{n_y} + (\theta_y N)^{n_y}} \\ -d_y \left(\frac{1}{2N} + y \right) + b_y N + \frac{m_x x^{n_x} N}{x^{n_x} + (\theta_x N)^{n_x}} \end{pmatrix}. \tag{5.56}$$

Je nach Wahl der Parameter besitzt dieses System keinen, einen oder zwei stabile $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte im positiven Quadranten. Abb. 5.5 zeigt zwei Beispiele eines bistabilen Systems mit (a) symmetrischer und (b) asymmetrischer Parameterwahl.

In Abb. 5.5 (a) entspricht \vec{j}_s in etwa zwei entgegengesetzten Dipolfeldern. Diese Topologie lässt sich auch bereits anhand der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte und des Rotationssinns von \vec{j}_s vorhersagen. Obwohl zwischen den beiden Dipolen auch ein \vec{j}_s -Sattel liegt, fällt dieser nicht mit dem ebenfalls vorhandenen $\vec{\alpha}$ -Sattel zusammen.

Das asymmetrische System in Abb. 5.5 (b) hingegen besitzt in \vec{j}_s zwei Zentren mit entgegengesetztem Rotationssinn, was sich ebenfalls bereits anhand der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte sowie des

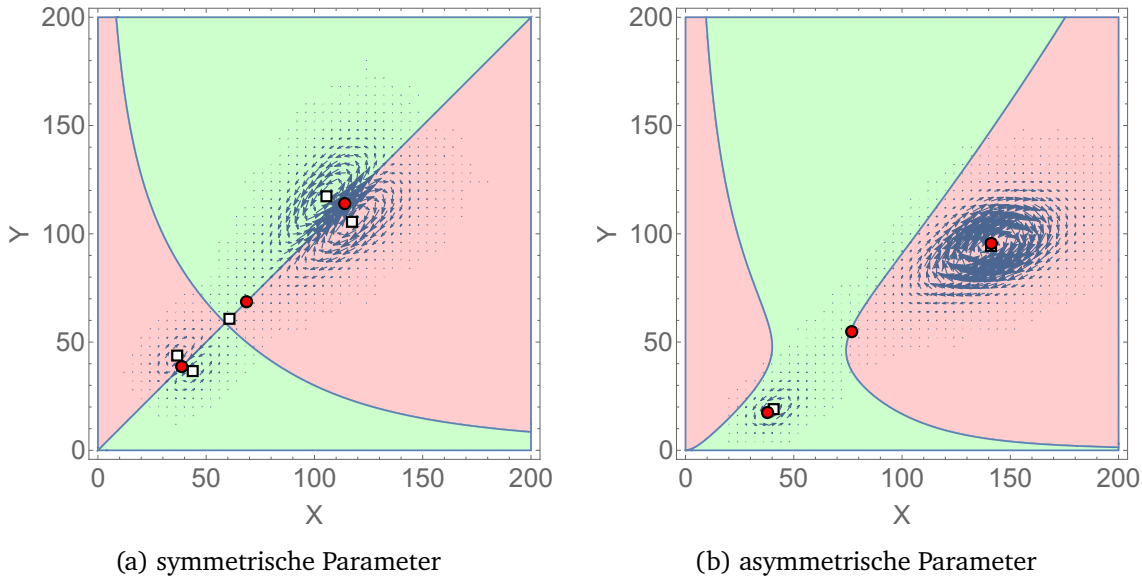


Abbildung 5.5 Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte (blaue Vektoren) für System (5.52). Die grüne/rote Hintergrundfarbe weist auf den vorhergesagten positiven/negativen Rotationssinn gemäß (5.10) hin. Die roten Punkte markieren den Ort der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte, die weißen Rechtecke die Fixpunkte von \vec{j}_s . Die Parameter lauten:

(a) $m_x = m_y = 1; n_x = n_y = 4; \Theta_x = \Theta_y = 4; d_x = d_y = 0,2; b_x = b_y = 0,34; N = 20$

(b) $m_x = m_y = 1; n_x = 4; n_y = 3; \Theta_x = \Theta_y = 4; d_x = 0,12; d_y = 0,22; b_x = 0,22; b_y = 0,15; N = 20$

Rotationssinns von \vec{j}_s ableiten lässt. In diesem Fall besitzt der Sattelpunkt in $\vec{\alpha}$ überhaupt keinen Gegenpart in \vec{j}_s .

Diese Beobachtungen stehen im Widerspruch zu Abschnitt 4.6, wo wir feststellen konnten, dass in führender Ordnung in $1/N$ die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s den Höhenlinien von p_s folgt, was bedeutet, dass Maxima, Minima und Sattelpunkte von p_s jeweils zur Ausbildung von \vec{j}_s -Fixpunkten am gleichen Ort führen sollten. Dieser Widerspruch kann sich nur dadurch erklären lassen, dass für die hier gewählten Parameter bereits Terme höherer Ordnung mit berücksichtigt werden müssten.

Interessanterweise ist der Effekt, dass Sattelpunkte in p_s auftreten können, die keine Entsprechung in \vec{j}_s finden, nicht spezifisch für das Beispiel der positiven Feedbackschleife, sondern lässt sich auch in einem viel allgemeineren Kontext beobachten: Je nach Rotationssinn von \vec{j}_s zu beiden Seiten eines p_s -Sattels existieren zwei unterschiedliche Möglichkeiten, wie sich \vec{j}_s am Ort dieses Sattels verhalten kann. Beide sind in Abb. 5.6 dargestellt.

In Abb. 5.6 (a) liegt der p_s -Sattel zwischen zwei Maxima mit dem gleichen Rotationssinn von \vec{j}_s . In diesem Fall kann sich ein passender \vec{j}_s -Sattel ausbilden. In Abb. 5.6 (b) jedoch verhindert die Topologie des Systems die Ausbildung eines \vec{j}_s -Sattels: Die beiden \vec{j}_s -Zentren mit entgegengesetztem Rotationssinn erzwingen einen konstanten Wahrscheinlichkeitsfluss in deren Mitte, genau am Ort wo der \vec{j}_s -Sattel liegen würde. Da dieser konstante Fluss dem erwarteten Verhalten von \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ widerspricht, muss er aus höheren Termen der $1/N$ -Näherung hervorgehen. Dies ist jedoch wenig überraschend, da der entgegengesetzte Rotationssinn von \vec{j}_s am Ort der beiden Wahrscheinlichkeitsmaxima

in Abb. 5.6 (b) automatisch einen Bereich mit $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} = 0$ im Bereich zwischen den beiden p_s -Maxima impliziert, wo sich auch der $\vec{\alpha}$ -Sattel befindet. Somit verschwindet der führende Term der $1/N$ -Entwicklung in der Nähe dieses Sattelpunkts, sodass höhere Terme dominieren. Der hierbei entstehende Wahrscheinlichkeitsfluss kann wieder als eine Art Dipolstrom angesehen werden, wobei hier jedoch – im Gegensatz zu den früheren Beispielen – keine neuen Zentren in \vec{j}_s entstehen.

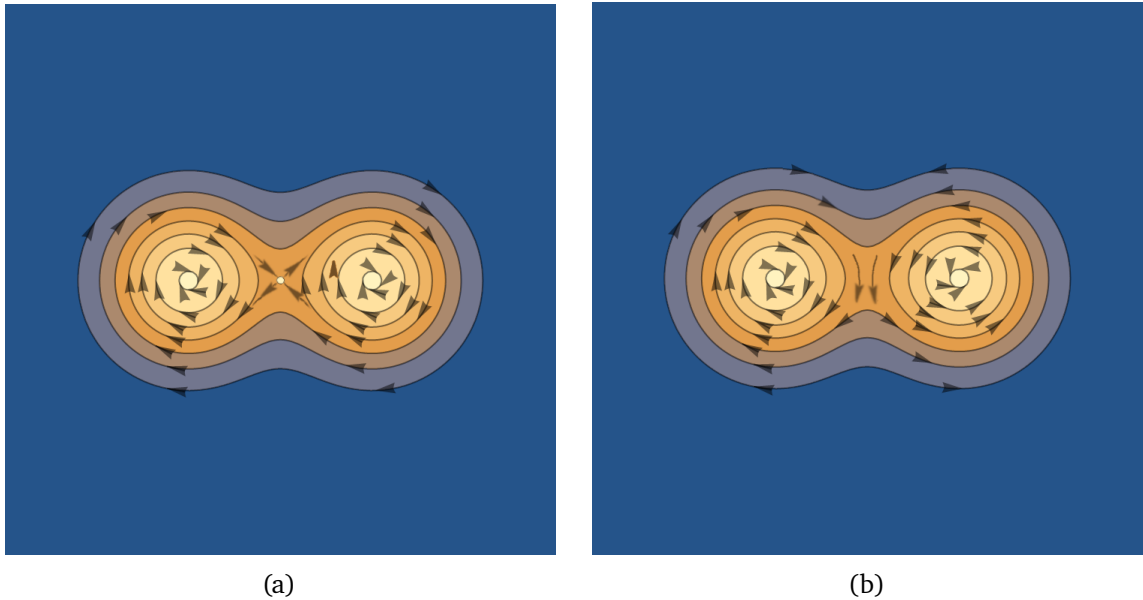


Abbildung 5.6 Sattelpunkte von p_s zwischen zwei p_s -Maxima können je nach Rotationssinn von \vec{j}_s zur Ausbildung eines zugehörigen \vec{j}_s -Sattels führen oder diesen verhindern.

(a) Ein Sattelpunkt von p_s zwischen zwei Maxima mit gleichem Rotationssinn von \vec{j}_s führt zur Ausbildung eines \vec{j}_s -Sattels am Ort des p_s -Sattels.

(b) Liegt ein Sattelpunkt von p_s zwischen zwei Maxima mit entgegengesetztem Rotationssinn von \vec{j}_s , kann sich dort kein \vec{j}_s -Sattel ausbilden.

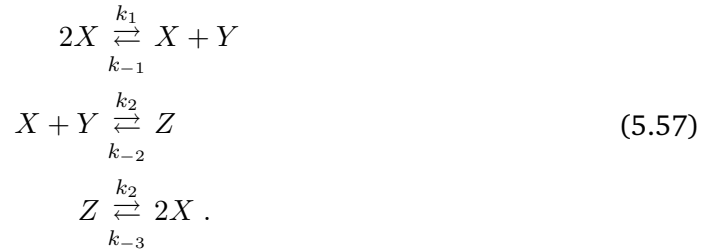
Farbverlauf: Höhenprofil von p_s .

Vektoren: Richtung von \vec{j}_s .

5.6 Unphysikalische stationäre Wahrscheinlichkeitsströme

Als weitere interessante Anwendung wollen wir nun noch Systeme betrachten, die unphysikalische stationäre Wahrscheinlichkeitsströme aufweisen. Diese entstehen, wenn die Mastergleichung des Systems detailliertes Gleichgewicht aufweist, gleichzeitig jedoch $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} \neq 0$ ist, sodass nach (4.12) nicht-verschwindende stationäre Wahrscheinlichkeitsströme auftreten [56]. Solche Ströme sind als unphysikalisch anzusehen, da Systeme im detaillierten Gleichgewicht automatisch auch im thermischen Gleichgewicht sein müssen, was jedoch dem Vorhandensein stationärer Wahrscheinlichkeitsströme widerspricht. Dieser Widerspruch kann nur durch die Näherungen bei der Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung im Rahmen der Kramers-Moyal-Entwicklung erklärt werden. Solche nichtphysikalischen stationären Wahrscheinlichkeitsströme stellen also eine Art Artefakt der vernachlässigten höheren Termen der Kramers-Moyal-Entwicklung dar.

Anhand der Methoden, die wir in diesem Kapitel entwickelt haben, wollen wir nun untersuchen, wie diese Ströme aussehen. Hierzu betrachten wir zunächst das Beispielsystem aus [56]:



Da die Gesamtteilchenzahl $n = n_X + n_Y + 2n_Z$ bzw. die Gesamtkonzentration $1 = x + y + 2z$ erhalten ist, lässt sich dieses System auf ein zweidimensionales System abbilden, das wir mit den oben beschriebenen Methoden untersuchen können.

Drift und Diffusion lauten:

$$\begin{aligned} f_1 &= -(k_1 + 2k_{-3})x(x-1) + (k_{-1} - k_2)xy \\ &\quad + (k_3 + \frac{1}{2}k_{-2}) \cdot (1 - x - y) \\ f_2 &= k_1x(x-1) + \frac{1}{2}k_{-2}(1 - x - y) \\ &\quad - (k_{-1} + k_2)xy \end{aligned} \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} D_{11} &= (k_1 + 4k_{-3})x(x-1) + (2k_3 + (k_{-1} + k_2)xy \\ &\quad + \frac{1}{2}k_{-2}) \cdot (1 - x - y) \\ D_{22} &= k_1x(x-1) + \frac{1}{2}k_{-2}(1 - x - y) + (k_{-1} + k_2)xy \\ D_{12} = D_{21} &= k_1x(x-1) + \frac{1}{2}k_{-2}(1 - x - y) - k_2xy - k_{-1}xy . \end{aligned} \quad (5.59)$$

Abb. 5.7 (a) zeigt den vorhergesagten Rotationssinn von \vec{j}_s sowie die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ zusammen mit dem tatsächlichen stationären Wahrscheinlichkeitsstrom aus der Fokker-Planck-Gleichung.

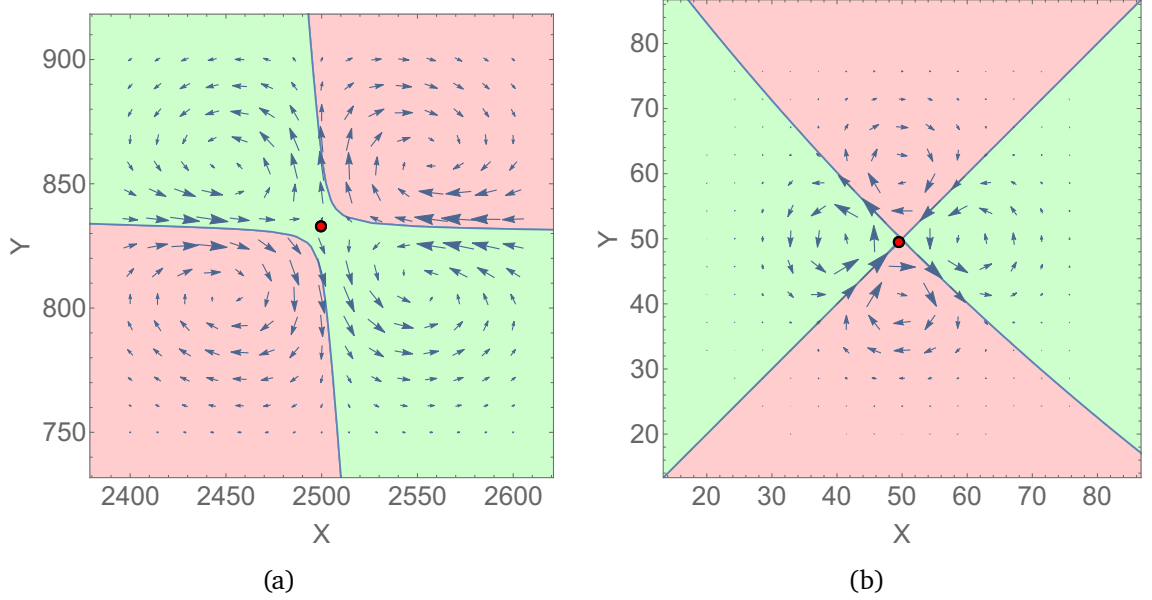


Abbildung 5.7 Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s (blau) für:
(a) Das Beispielsystem (5.57) von Ceccato et al. mit den dort gewählten Parametern, die in unserer Notation lauten: $k_1 = 1; k_{-1} = 3; k_2 = 2; k_{-2} = 500; k_3 = 75; k_{-3} = 0,1; n = 2 \cdot 10^4$.
(b) Das Modell (5.62) mit den Parametern $r = 50; s = \lambda = 1; N = 1$.
Die grüne (rote) Hintergrundfarbe markiert Bereiche mit positiv (negativ) vorhergesagtem Rotationssinn nach Gleichung (5.31). Rote Punkte markieren die Fixpunkte von $\vec{\alpha}$.

Wie man sieht, ist die Übereinstimmung zwischen der erwarteten Topologie von \vec{j}_s und dem tatsächlichen numerischen Verlauf recht gut. Der vorhergesagte Rotationssinn von \vec{j}_s in Abb. 5.7(a) kann hierbei als eine Art vereinfachte Version von Abb. 3 in [56] angesehen werden, bei der lediglich das Vorzeichen von $\mathcal{R}(\tilde{\eta})$ dargestellt wird.

Ein weiteres Beispielsystem, bei dem unphysikalische stationäre Wahrscheinlichkeitsströme auftreten können, ist gegeben durch

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} (r - sx) + \lambda(y - x) \\ (r - sy) + \lambda(x - y) \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} r + sx + \lambda(x + y) & -\lambda(x + y) \\ -\lambda(x + y) & r + sy + \lambda(x + y) \end{pmatrix}, \quad (5.61)$$

mit den Spezieskonzentrationen $x, y > 0$ und den Parametern $r, s > 0$, was den Reaktions-

gleichungen

$$\begin{aligned}
 \emptyset &\overset{r}{\rightleftharpoons} X \\
 &\underset{s}{\rightleftharpoons} \\
 \emptyset &\overset{r}{\rightleftharpoons} Y \\
 &\underset{s}{\rightleftharpoons} \\
 X &\overset{\lambda}{\rightleftharpoons} Y \\
 &\underset{\lambda}{\rightleftharpoons}
 \end{aligned} \tag{5.62}$$

entspricht. Diese erfüllen detailliertes Gleichgewicht [69].

Die hier auftretenden unphysikalischen Wahrscheinlichkeitsströme sind in Abb. 5.7 (b) dargestellt.

Am Ort des Fixpunkts gilt $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0$. Interessanterweise nimmt die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte in diesem System nicht die Form eines Dipols an, wie wir es sonst bei Systemen mit $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} = 0$ immer beobachten konnten, sondern die eines Quadrupols. Genau wie der Dipol ist dieser symmetrisch unter Vertauschung von X und Y . Im Gegensatz zu diesem besitzt der Quadrupol jedoch einen Fixpunkt in Form eines Sattels am Ort des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts.

Es ist weiterhin interessant zu sehen, dass für dieses System sogar $\vec{\nabla} \times \vec{\alpha} = 0$ gilt. Dies bedeutet, dass die unphysikalischen Ströme hier allein aus der Konzentrationsabhängigkeit der Diffusionsmatrix stammen, die zu $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} \neq 0$ führt. Wir wollen diese Art von unphysikalischen stationären Wahrscheinlichkeitsströmen daher als *diffusionsinduzierte unphysikalische Wahrscheinlichkeitsströme* bezeichnen. Im Gegensatz zu diesen, weist das System (5.57) bereits in seiner deterministischen Drift einen bevorzugten Rotationssinn auf, sodass $\vec{\nabla} \times \vec{f} \neq 0$ gilt. Dies ist (solange in der Mastergleichung detailliertes Gleichgewicht vorherrscht) bereits ausreichend für das Auftreten unphysikalischer Wahrscheinlichkeitsströme, selbst wenn die Diffusionsmatrix konstant und proportional zur Einheitsmatrix wäre. Man könnte daher in diesem Zusammenhang auch von *driftinduzierten unphysikalischen Wahrscheinlichkeitsströmen* sprechen.

5.7 Fazit

Wir haben eine Methode entwickelt, mit der sich die Topologie von \vec{j}_s allein anhand des Konvektionsfelds und der Diffusionsmatrix abschätzen lässt, ohne dass die Fokker-Planck-Gleichung gelöst werden muss. Dies ergänzt unsere bisherigen Methoden zur Abschätzung von p_s anhand der gleichen Grundgrößen, sodass nun auch eine umfassende Untersuchung von Nichtgleichgewichtssystemen möglich ist.

Diese Vorhersage der Topologie basiert auf dem Rotationssinn von \vec{j}_s , der mit dem Vorzeichen von $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha}$ in Verbindung steht sowie der Lage der \vec{j}_s -Fixpunkte, die für $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1}\vec{\alpha} \gg 0$ mit den Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ sowie den Extrema von p_s übereinstimmen.

Durch die Anwendung auf verschiedene Beispielsysteme, haben wir die Vorhersagekraft dieser Methode untersucht. Für Systeme mit eindeutig positivem bzw. negativem Rotationssinn waren die Vorhersagen der Topologie von \vec{j}_s stets sehr akkurat. Doch auch Systeme, bei denen der $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt sehr nah an der Grenzlinie zwischen positivem und negativem Rotationssinn liegt, sodass die Güte der zugrunde liegenden $1/N$ -Näherung besonders gering ist, lassen sich anhand des vorhergesagten Rotationssinn verstehen.

Obwohl in diesen Fällen am Ort des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts kein \vec{j}_s -Fixpunkt entstehen kann, bildet sich in praktisch allen untersuchten Fällen ein Dipolstrom aus, dessen Dipolachse eine Tangente an die Grenzlinie zwischen positivem und negativen Rotationssinn bildet. Interessanterweise konnten wir zudem feststellen, dass sich in diesen Fällen ein p_s -Maximum in unmittelbarer Nähe des $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts ausbildet, sodass der Fixpunkt des Konvektionsfelds weiterhin in guter Näherung als präferierter Zustand des Systems angesehen werden kann und stochastische Phasenportraits angefertigt werden können. Auch wenn die Gründe für diese räumliche Nähe bislang noch nicht identifiziert werden konnten, liefert die hier durchgeführte Untersuchung von Dipolströmen einen deutlichen Erkenntnisgewinn bezüglich des Verhaltens eines stochastischen Systems, wenn die $1/N$ -Näherung aus Abschnitt 4.6 zusammenbricht.

Um die möglichen \vec{j}_s -Ströme, die in stochastischen Reaktionssystemen auftreten können, besser zu verstehen, haben wir unsere Untersuchungen zunächst auf einfache Reaktionssysteme, in denen lediglich einzelne, isolierte Kopplungsterme auftreten, beschränkt. Diese Untersuchungen konnten dann als Grundlage für die Untersuchung realistischer Reaktionssysteme, wie beispielsweise der positiven Feedbackschleife und des Rosenzweig-MacArthur-Modells genutzt werden. Zudem konnten wir anhand dieser einfachen Beispiele ein Kriterium herausarbeiten, das angibt unter welchen Bedingungen sich in einem gegebenen Reaktionssystem Dipolströme ausbilden. Hierbei zeigte sich, dass Dipolströme sowohl aufgrund spezieller, symmetrischer Parameterwerte auftreten können, als auch in einer bestimmten Klasse von Systemen, die unabhängig von der Wahl der Parameter solche Wahrscheinlichkeitsströme höherer Ordnung aufweisen.

In all diesen Beispielen zeigte sich, dass unsere einfache Formel zur Abschätzung des Rotationssinns von \vec{j}_s , die eigentlich nur für Systeme mit konstanter, isotroper Diffusion oder für sehr große Systemgrößen gültig ist, auch außerhalb dieser Grenzfälle äußerst zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

6 Diskussion

Ziel des in der vorliegenden Arbeit entwickelten Formalismus des Konvektionsfelds und der stochastischen Phasenportraits war es, einen möglichst einfachen Zugang zur Analyse stochastischer Reaktionsnetzwerke zu schaffen, der sowohl in seinen Anwendungsmöglichkeiten als auch in den verwendeten mathematischen Methoden eng an die deterministische Modellierung von Reaktionsnetzwerken als dynamisches System angelehnt ist. Hierzu wurde in Kapitel 3 zunächst die Größe des eindimensionalen Konvektionsfelds $\alpha(x)$ vorgestellt, deren Nullstellen genau den Maxima und Minima der Wahrscheinlichkeitsdichte p_s entsprechen, die sich als Lösung der eindimensionalen, stationären Fokker-Planck-Gleichung ergibt.

Da dieser Ansatz im Gegensatz zu bisherigen Methoden zur stochastischen Korrektur deterministischer Ratengleichungen anstelle eines korrigierten Mittelwerts die Extrema der Wahrscheinlichkeitsdichte in den Fokus rückt, lassen sich mit seiner Hilfe auch multimodale Verteilungen problemlos analysieren. Gleichzeitig gehen diese Extrema im Grenzfall großer Systeme – genauso wie der Mittelwert der Verteilung – in die Nullstellen der deterministischen Drift über, sodass eine Korrespondenz mit der deterministischen Beschreibung als dynamisches System automatisch gegeben ist. Im Gegensatz zu vergleichbaren Methoden, welche oftmals auch eine Analyse der Zeitabhängigkeit des Systems ermöglichen [47, 70], erlaubt das Konvektionsfeld allerdings nur eine Beschreibung der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte.

Für eine Vielzahl von Untersuchungen reicht jedoch diese alleinige Kenntnis des Langzeitverhaltens des stochastischen Systems völlig aus. Dies betrifft insbesondere die Bifurkationsanalyse, die sich anhand des Konvektionsfelds auf sehr elegante Weise durchführen lässt. Im Rahmen der Theorie stochastischer dynamischer Systeme unterscheidet man üblicherweise zwei Arten von stochastischen Bifurkationen: die dynamische oder d-Bifurkation und die phänomenologische oder p-Bifurkation. Während erstere dadurch gekennzeichnet ist, dass das Rauschen des stochastischen dynamischen Systems am Ort der Bifurkation vollständig verschwindet, sodass die Dynamik in zwei Subsysteme aufgespalten wird, zwischen denen die Trajektorien des Systems jenseits des Bifurkationspunkts nicht mehr wechseln können, steht letztere für das Entstehen und Vergehen von Wahrscheinlichkeitsextrema. Da das Rauschen eines chemischen Reaktionsnetzwerks jedoch nur für $\vec{x} = 0$ komplett verschwinden kann, weil die einzelnen Beiträge zur Diffusion stets positiv sind, können hier im relevanten Bereich positiver Teilchenkonzentrationen ausschließlich p-Bifurkationen, jedoch keine d-Bifurkationen auftreten [28, 34]. Das Entstehen und Vergehen von Maxima und Minima bei einer solchen p-Bifurkationen spiegelt sich dann als eine gewöhnliche Bifurkation im Konvektionsfeld wider.

Wir haben somit das Konzept von Fixpunkten, linearer Stabilitätsanalyse und Bifurkationsanalysen erfolgreich auf eindimensionale stochastische Systeme übertragen. Bei der Erweiterung auf zweidimensionale Systeme tritt jedoch sehr schnell ein entscheidendes Problem zutage: Während im Eindimensionalen bereits aus der Stationaritätsbedingung

ein Verschwinden des stationären Wahrscheinlichkeitsstroms ($j_s = 0$) hervorgeht, woraus sich die Äquivalenz der α -Fixpunkte mit den p_s -Extrema ergibt, wird die Stationaritätsbedingung in mehrdimensionalen Systemen auch durch divergenzfreie Systeme mit $\vec{j}_s \neq 0$ erfüllt. Obwohl es hier naheliegend erscheint, sich zunächst auf die Systeme mit $\vec{j}_s \equiv 0$ zu konzentrieren, da sich dort der bisherige Formalismus eins zu eins übertragen lässt, mussten wir feststellen, dass solche Systeme praktisch nur auftreten, solange die beiden Spezies völlig ungekoppelt sind oder – wie im Fall des Ameisenmodells – eine Erhaltungsgröße vorliegt, die das System effektiv eindimensional werden lässt. Nichtsdestotrotz lassen sich bei Anwendung des zweidimensionalen Konvektionsfelds auf solche Systeme auf äußerst elegante Weise Ergebnisse erzielen, die bislang ein explizites Lösen der Fokker-Planck-Gleichung voraussetzten.

Interessiert man sich jedoch für Systeme mit $\vec{j}_s \neq 0$, kann der bisherige Formalismus des Konvektionsfelds zunächst nicht mehr angewandt werden. Stattdessen lassen sich in solchen Systemen höchstens noch einzelne $\vec{\alpha}$ -Fixpunkte identifizieren, an denen gleichzeitig $\vec{j}_s = 0$ ist und somit ein p_s -Extremum vorliegt. Wir haben diese Punkte als präferierte bzw. gemiedene Zustände des Systems bezeichnet. Da für die Bestimmung solcher Fixpunkte jedoch die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s des Systems bekannt sein muss, war es nötig eine Näherung für \vec{j}_s zu entwickeln. Diese ist gültig für ausreichend große Systemgrößen N . Es stellte sich heraus, dass das so genäherte \vec{j}_s in führender Ordnung in $1/N$ stets den Höhenlinien von p_s folgt, sodass in dieser Näherung die Fixpunkte von \vec{j}_s mit den Extrema von p_s und somit auch mit den Fixpunkten von $\vec{\alpha}$ zusammenfallen. In führender Ordnung in $1/N$ stellen also alle Fixpunkte von $\vec{\alpha}$ präferierte bzw. gemiedene Zustände des Systems dar. Da dieses Resultat offensichtlich nur in ganz bestimmten Fällen gültig sein kann, haben wir anschließend untersucht wie sich die Güte dieser \vec{j}_s -Näherung abschätzen lässt. Hierbei stellte sich heraus, dass der führende Term der Näherung an Orten, an denen $\vec{\nabla} \times \mathbf{D}^{-1} \vec{\alpha} = 0$ gilt, verschwindet. Liegt ein $\vec{\alpha}$ -Fixpunkt in einer solchen Region, stellt dieser somit keinen präferierten bzw. gemiedenen Zustand des Systems dar. Dennoch haben wir anhand verschiedener Beispiele gesehen, dass sich in der Regel auch an solchen $\vec{\alpha}$ -Fixpunkten ein p_s -Extremum in unmittelbarer Nähe dieses Fixpunkts ausbildet, während in \vec{j}_s Dipolströme entstehen. Wir haben bislang jedoch keine allgemeingültige Erklärung für diesen Umstand gefunden. Eine genauere Analyse der Voraussetzungen, die zu solchen Dipolströmen und insbesondere zur Entstehung eines p_s -Extremums in der Nähe eines solchen $\vec{\alpha}$ -Fixpunkts führen, wäre ein guter Anschlusspunkt für weitere Untersuchungen. Hierzu könnten sich topologische Argumente wie beispielsweise der Poincaré-Index, anbieten. Auch die Existenz von falsch-positiven Fixpunkten in $\vec{\alpha}$, denen keinerlei p_s -Extremum zugeordnet werden kann, ließe sich womöglich durch ein solches Argument ausschließen. Bislang konnten wir lediglich zeigen, dass solche Fixpunkte in führender Ordnung in $1/N$ nicht vorkommen können. Zudem konnten wir solche Fixpunkte auch in keinem einzigen Beispiel identifizieren. Im Gegensatz hierzu können mit den langsamen transienten Zuständen jedoch durchaus p_s -Extrema entstehen, die keinem Fixpunkt in $\vec{\alpha}$ entsprechen, wie wir unter anderem am Beispiel des Rosenzweig-McArthur-Modells sehen konnten.

Anhand dieses Modells haben wir auch die stochastischen Phasenportraits eingeführt, an denen sich das qualitative Langzeitverhalten des stochastischen Systems ablesen lässt. Hierzu

werden die Pseudo-Trajektorien des dynamischen Systems

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{\alpha}(\vec{x}) \quad (6.1)$$

geplottet. Auch wenn man leicht annehmen könnte, dass die so berechneten Bahnen den zeitlichen Verlauf der Wahrscheinlichkeitsmaxima und -minima angeben, ist dies keineswegs der Fall, wie bereits in Abschnitt 4.8 diskutiert wurde.

Ein konzeptionell ähnlicher Ansatz zu den Pseudotrajektorien (6.1) wurde von Cheng et al. vorgeschlagen [23], wo die tatsächliche Zeitentwicklung des Maximums eines zufälligen dynamischen Systems untersucht wird. Im Gegensatz zu den oben definierten Pseudo-Trajektorien ist dieser Ansatz jedoch nur für Systeme gültig, die zu jedem Zeitpunkt t unimodal bleiben, was eine Untersuchung stochastischer p-Bifurkationen unmöglich macht. Zudem geht dieser Formalismus stets von einer δ -Funktion als Anfangsverteilung aus. Ein Vorteil des Ansatzes von Cheng et al. ist hingegen, dass er mit der genauen Zeitentwicklung des Maximums auch Informationen liefert, die in den hier definierten Pseudotrajektorien nicht enthalten sind. Beide Ansätze sind also komplementär zueinander.

Obwohl die Pseudotrajektorien keine unmittelbare anschauliche Bedeutung besitzen, lässt sich mit ihrer Hilfe dennoch ein aussagekräftiges Phasenportrait des stochastischen Systems anfertigen. Dies liegt daran, dass die Fixpunkte des dynamischen Systems (6.1) in der Regel den Extrema von p_s entsprechen und Grenzzyklen von (6.1) den Wahrscheinlichkeitskratern in p_s . Letzteres haben wir zwar anhand des Rosenzweig-McArthur-Modells gesehen, konnten es jedoch bislang nicht beweisen. Auch an dieser Stelle wären weitere Untersuchungen sicher aufschlussreich.

Einen weiteren interessanten Ansatzpunkt für die Anwendung des Konvektionsfelds bietet sicher auch die eingehendere Untersuchung der stochastischen Hopfbifurkation. Auch wenn eine genaue Messung des Bifurkationspunkts aufgrund der Ähnlichkeit der Histogramme eines engen stochastischen Grenzzyklus und eines stabilen Fixpunkts nahezu unmöglich ist, wäre es interessant zu untersuchen, inwieweit rauschinduzierte Oszillationen, wie sie in verschiedenen stochastischen Systemen vorkommen können [16, 25, 33, 71, 72], mithilfe des Konvektionsfelds vorhergesagt werden können. Erste Untersuchungen in dieser Richtung zeigen jedoch, dass zumindest solche Hopfbifurkationen, die durch reine Änderung der Systemgröße N hervorgerufen werden, vom Konvektionsfeld nicht korrekt erfasst werden [66]. Eine Ausdehnung dieser Untersuchungen auf andere Beispielsysteme wäre hier sicher erstrebenswert.

Trotz der Schwierigkeiten bei der Untersuchung der Hopf-Bifurkation im Rosenzweig-Mac-Arthur-Modell konnten wir abseits des Bifurkationspunkts mithilfe der stochastischen Phasenportraits ausgezeichnete Vorhersagen treffen. Hierbei konnten insbesondere zwei stochastische Bifurkationen vorhergesagt werden, bei denen bei Verringerung der Systemgröße zunächst ein Randmaximum entsteht und schließlich der stabile Fixpunkt im Inneren des Zustandsraums verschwindet. Während Letzteres durch eine gewöhnliche Sattelnodenbifurkation in $\vec{\alpha}$ ausgelöst wird, stellt Ersteres ein interessantes Phänomen dar, das nur in stochastischen Systemen auftreten kann. Da diese Bifurkation mit einem Richtungswechsel der Lücke zwischen zwei Nullklinen in Verbindung steht, haben wir sie Nullklinen-Lücken-Bifurkation genannt.

In Kapitel 5 haben wir uns schließlich mit der Topologie der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s befasst. Hierzu haben wir eine Methode zur Vorhersage dieser Topologie

entwickelt, die allein auf der Auswertung des Konvektionsfelds und der Diffusion beruht und ohne Lösen der Fokker-Planck-Gleichung auskommt. In Kombination mit unseren bisherigen Methoden lassen sich somit nun auch stationäre Nichtgleichgewichtszustände adäquat analysieren.

Um die Vorhersagen dieser Methode zu überprüfen, haben wir verschiedene zweidimensionale Beispielsysteme betrachtet, die einzelne, isolierte Kopplungsterme aufwiesen. Hierbei zeigten sich die bereits angesprochenen Dipolströme bei allen Systemen, bei denen die $1/N$ -Näherung für \vec{j}_s zusammenbricht. Bei der anschließenden Analyse realistischer Reaktionssysteme konnte die Topologie von \vec{j}_s auch im System mit Grenzzyklus sowie bei der multimodalen positiven Feedbackschleife korrekt vorausgesagt werden.

Hierbei konnten wir eine generische Situation identifizieren, bei der die \vec{j}_s -Näherung in führender Ordnung in $1/N$ zusammenbricht und die sich gut in unsere bisherigen Ergebnisse einordnen lässt. Diese Situation tritt immer dann auf, wenn zwei benachbarte p_s -Maxima mit unterschiedlichem Rotationssinn von \vec{j}_s auftreten, in deren Mitte ein $\vec{\alpha}$ -Sattel liegt: Diesem Sattelpunkt lässt sich dann kein \vec{j}_s -Sattel mehr zuordnen.

Zuletzt haben wir außerdem untersucht, wie die stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j}_s in Systemen aussieht, die laut Mastergleichung ein detailliertes Gleichgewicht aufweisen. Obwohl ein solches detailliertes Gleichgewicht in vielen Standardwerken zur Fokker-Planck-Gleichung mit $\vec{j}_s = 0$ gleichgesetzt wird [20], ist inzwischen bekannt, dass aufgrund der Näherung in der Kramers-Moyal-Entwicklung Artefakte auftreten können, die nicht-verschwindende stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichten hervorrufen [56]. Bislang lagen jedoch noch keine Kenntnisse über den genauen Verlauf dieser unphysikalischen stationären Wahrscheinlichkeitsströme vor. Durch Anwendung unserer Vorhersagemethode lässt sich dieser nun leicht abschätzen. Bei dieser Analyse sowie der Untersuchung eines weiteren Beispiels unphysikalischer stationärer Wahrscheinlichkeitsströme zeigten sich jeweils (nahezu) quadrupolartige Verläufe. Hier wäre es sicherlich interessant zu erforschen, inwiefern sich unphysikalische stationäre Wahrscheinlichkeitsströme von physikalischen unterscheiden und ob hier höherwertige Terme der $1/N$ -Entwicklung, wie beispielsweise der Quadrupol, möglicherweise bevorzugt auftreten.

Während die verschiedenen Beispielsysteme in dieser Arbeit einen guten Einblick in das vermitteln konnten, was die hier erarbeiteten Methoden leisten und welche stochastischen Effekte mit ihrer Hilfe adäquat untersucht werden können, lassen sich sicherlich ebenso viele Beispiele von stochastischen Effekten finden, die durch das Konvektionsfeld nicht korrekt erfasst werden können. Hierzu zählen einerseits Systeme, bei denen die $1/N$ -Näherung zusammenbricht, sodass Aussagen zur Lage der Wahrscheinlichkeitsextrema nur noch eingeschränkt möglich sind, andererseits jedoch auch Systeme, bei denen bereits die Fokker-Planck-Gleichung im Vergleich zur Mastergleichung fehlerbehaftet ist. Dies ist vor allem bei Systemen mit äußerst geringer Teilchenzahl der Fall, tritt jedoch beispielsweise auch bei bestimmten Arten rauschinduzierter Bistabilität auf [21, 73].

Doch auch in Systemen, in denen Konvektionsfeld und stochastische Phasenportraits gute Ergebnisse liefern, stellen diese lediglich eine recht grobe Vereinfachung des Systems dar. So liegt beispielsweise keinerlei Information zur relativen Gewichtung der einzelnen Extrema vor. Diese Information wäre aber in vielen Systemen besonders wertvoll, da oftmals einzelne Maxima das System praktisch vollständig dominieren, während die übrigen Maxima im Histogramm kaum zu erkennen sind. Auch die Breite eines Maximums lässt sich lediglich

auf Grundlage der Linear-Noise-Näherung abschätzen, geht jedoch nicht direkt aus $\vec{\alpha}$ oder den stochastischen Phasenportraits hervor. Bei multimodalen Systemen interessiert man sich zudem oft für die mittlere Aufenthaltsdauer in einem präferierten Zustand, die hier ebenfalls unbekannt bleibt. Eine Abschätzung dieser Größen anhand von Drift bzw. Konvektionsfeld und Diffusion, wie sie beispielsweise für die mittlere Aufenthaltsdauer in eindimensionalen bistabilen Systemen bereits in [18] durchgeführt wurde, würde sicherlich eine gewinnbringende Erweiterung des hier entwickelten Formalismus darstellen und bietet sich als weiterer Anknüpfungspunkt für künftige Arbeiten an.

Literaturverzeichnis

- [1] D. Kondepudi and I. Prigogine, *Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures*. John Wiley & Sons, 2014.
- [2] G. Nicolis, “Self-organization in nonequilibrium systems,” *Dissipative Structures to Order through Fluctuations*, pp. 339–426, 1977.
- [3] T. Aquino, E. Abranches, and A. Nunes, “Stochastic single-gene autoregulation,” *Physical Review E*, vol. 85, no. 6, p. 061913, 2012.
- [4] Y. N. Kaznessis, “Models for synthetic biology,” *BMC Systems Biology*, vol. 1, no. 1, p. 47, 2007.
- [5] N. E. Radde and M.-T. Hütt, “The physics behind systems biology,” *EPJ Nonlinear Biomedical Physics*, vol. 4, no. 1, p. 7, 2016.
- [6] T. Britton, “Stochastic epidemic models: A survey,” *Mathematical Biosciences*, vol. 225, no. 1, pp. 24–35, 2010.
- [7] M. J. Keeling and J. V. Ross, “On methods for studying stochastic disease dynamics,” *Journal of the Royal Society Interface*, vol. 5, no. 19, pp. 171–181, 2008.
- [8] A. J. Black and A. J. McKane, “Stochasticity in staged models of epidemics: quantifying the dynamics of whooping cough,” *Journal of the Royal Society Interface*, vol. 7, no. 49, pp. 1219–1227, 2010.
- [9] R. A. Blythe and A. J. McKane, “Stochastic models of evolution in genetics, ecology and linguistics,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2007, no. 07, p. P07018, 2007.
- [10] A. J. Black and A. J. McKane, “Stochastic formulation of ecological models and their applications,” *Trends in Ecology & Evolution*, vol. 27, no. 6, pp. 337–345, 2012.
- [11] S. Wasserman, K. Faust, *et al.*, *Social Network Analysis: Methods and Applications*, vol. 8. Cambridge university press, 1994.
- [12] R. A. Holley and T. M. Liggett, “Ergodic theorems for weakly interacting infinite systems and the voter model,” *The Annals of Probability*, pp. 643–663, 1975.
- [13] S. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. Studies in Nonlinearity, Avalon Publishing, 2014.

-
- [14] T. Biancalani, L. Dyson, and A. J. McKane, “Noise-induced bistable states and their mean switching time in foraging colonies,” *Physical Review Letters*, vol. 112, p. 038101, Jan 2014.
- [15] T. Plesa, K. C. Zygalakis, D. F. Anderson, and R. Erban, “Noise control for molecular computing,” *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 15, no. 144, p. 20180199, 2018.
- [16] R. P. Boland, T. Galla, and A. J. McKane, “How limit cycles and quasi-cycles are related in systems with intrinsic noise,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2008, no. 09, p. P09001, 2008.
- [17] N. V. Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Amsterdam: Elsevier, 3 ed., 2011.
- [18] D. T. Gillespie, *Markov Processes: An Introduction for Physical Scientists*. Elsevier, 1991.
- [19] D. T. Gillespie, “Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions,” *The Journal of Physical Chemistry*, vol. 81, no. 25, pp. 2340–2361, 1977.
- [20] C. W. Gardiner *et al.*, *Handbook of Stochastic Methods*, vol. 3. Springer Berlin, 1985.
- [21] R. Grima, P. Thomas, and A. V. Straube, “How accurate are the nonlinear chemical Fokker-Planck and chemical Langevin equations?,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 135, no. 8, p. 084103, 2011.
- [22] R. Grima, “An effective rate equation approach to reaction kinetics in small volumes: Theory and application to biochemical reactions in nonequilibrium steady-state conditions,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 133, p. 35101, July 2010.
- [23] Z. Cheng, J. Duan, and L. Wang, “Most probable dynamics of some nonlinear systems under noisy fluctuations,” *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 30, no. 1-3, pp. 108–114, 2016.
- [24] M. Scott, T. Hwa, and B. Ingalls, “Deterministic characterization of stochastic genetic circuits,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, no. 18, pp. 7402–7407, 2007.
- [25] A. J. McKane and T. J. Newman, “Predator-prey cycles from resonant amplification of demographic stochasticity,” *Physical Review Letters*, vol. 94, p. 218102, Jun 2005.
- [26] M. H. Davis, “Piecewise-deterministic Markov processes: A general class of non-diffusion stochastic models,” *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, vol. 46, no. 3, pp. 353–376, 1984.
- [27] Y. T. Lin and T. Galla, “Bursting noise in gene expression dynamics: linking microscopic and mesoscopic models,” *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 13, no. 114, p. 20150772, 2016.
- [28] L. Arnold, “Random dynamical systems,” in *Dynamical systems*, pp. 1–43, Springer, 1995.

-
- [29] C. Chiarella, X.-Z. He, D. Wang, and M. Zheng, “The stochastic bifurcation behaviour of speculative financial markets,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 15, pp. 3837–3846, 2008.
- [30] S. K. Hahl and A. Kremling, “A comparison of deterministic and stochastic modeling approaches for biochemical reaction systems: On fixed points, means, and modes,” *Frontiers in Genetics*, vol. 7, p. 157, 2016.
- [31] M. Pájaro and A. A. Alonso, “On the applicability of deterministic approximations to model genetic circuits,” *IFAC-PapersOnLine*, vol. 49, no. 7, pp. 206–211, 2016.
- [32] R. Grima, “Investigating the robustness of the classical enzyme kinetic equations in small intracellular compartments,” *BMC systems biology*, vol. 3, no. 1, p. 101, 2009.
- [33] D. Alonso, A. J. McKane, and M. Pascual, “Stochastic amplification in epidemics,” *Journal of the Royal Society Interface*, vol. 4, no. 14, pp. 575–582, 2006.
- [34] C. C. Buck, “Analyse von D- und P-Bifurkationen im Kontext stochastischer Reaktionsmodelle.” Bachelor Thesis, AG Drossel, 2017.
- [35] M. Ullah and O. Wolkenhauer, *Stochastic approaches for systems biology*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [36] C. S. Holling, “The functional response of predators to prey density and its role in mimicry and population regulation,” *The Memoirs of the Entomological Society of Canada*, vol. 97, no. S45, pp. 5–60, 1965.
- [37] L. Michaelis and M. L. Menten, *Die Kinetik der Invertinwirkung*. Universitätsbibliothek Johann Christian Senckenberg, 2007.
- [38] D. T. Gillespie, “A rigorous derivation of the chemical master equation,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 188, no. 1, pp. 404–425, 1992.
- [39] S. Ramsey, “Dizzy Gillespie.” <http://magnet.systemsbiology.net/software/Dizzy/>, 2006. [Online; abgerufen am 06.05.2020].
- [40] L. E. Reichl, “A modern course in statistical physics,” 1999.
- [41] R. Erban, S. J. Chapman, I. G. Kevrekidis, and T. Vejchodský, “Analysis of a stochastic chemical system close to a SNIPER bifurcation of its mean-field model,” *SIAM Journal on Applied Mathematics*, vol. 70, pp. 984–1016, Jan. 2009.
- [42] J. Falk, M. Mendler, and B. Drossel, “A minimal model of burst-noise induced bistability,” *PloS one*, vol. 12, no. 4, p. e0176410, 2017.
- [43] D. T. Gillespie, *Markov processes: an introduction for physical scientists*. Elsevier, 1991.
- [44] N. G. Van Kampen, “The expansion of the master equation,” *Advances in Chemical Physics*, vol. 34, pp. 245–309, 1976.

-
- [45] H. Risken, “Fokker-Planck equation,” in *The Fokker-Planck Equation*, pp. 63–95, Springer, 1996.
- [46] R. Pawula, “Approximation of the linear Boltzmann equation by the Fokker-Planck equation,” *Physical Review*, vol. 162, no. 1, p. 186, 1967.
- [47] D. Schnoerr, G. Sanguinetti, and R. Grima, “Approximation and inference methods for stochastic biochemical kinetics—a tutorial review,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2016.
- [48] H. Crauel and M. Gundlach, *Stochastic Dynamics*. Springer Science & Business Media, 1999.
- [49] M. Scott, “Applied stochastic processes in science and engineering,” *University of Waterloo, eBook*, 2013.
- [50] F. Schlögl, “Chemical reaction models for non-equilibrium phase transitions,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 253, no. 2, pp. 147–161, 1972.
- [51] T. Wilhelm, “The smallest chemical reaction system with bistability,” *BMC systems biology*, vol. 3, no. 1, p. 90, 2009.
- [52] J. Falk, *Stochastische Modelle und Umgebungseffekte im Kontext der Synthetischen Biologie*. PhD thesis, Technische Universität, 2019.
- [53] M. Mendler, J. Falk, and B. Drossel, “Analysis of stochastic bifurcations with phase portraits,” *PloS one*, vol. 13, no. 4, p. e0196126, 2018.
- [54] M. Mendler and B. Drossel, “Predicting properties of the stationary probability currents for two-species reaction systems without solving the Fokker-Planck equation,” *Physical Review E*, vol. 102, p. 022208, Aug 2020.
- [55] A. Gray Jr, “Uniqueness of steady-state solutions to the Fokker-Planck equation,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 6, no. 4, pp. 644–647, 1965.
- [56] A. Ceccato and D. Frezzato, “Remarks on the chemical Fokker-Planck and Langevin equations: Nonphysical currents at equilibrium,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 148, no. 6, p. 064114, 2018.
- [57] F. Kelly, *Reversibility and Stochastic Networks*. Wiley Series in Tracts on Probability and Statistics, J. Wiley, 1979.
- [58] M. Mendler, “Untersuchung von Methoden zur Charakterisierung stochastischer Reaktionsnetzwerke anhand der Wahrscheinlichkeitsmaxima,” Master’s thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.
- [59] M. L. Rosenzweig and R. H. MacArthur, “Graphical representation and stability conditions of predator-prey interactions,” *The American Naturalist*, vol. 97, no. 895, pp. 209–223, 1963.

-
- [60] A. D. Bazykin, *Nonlinear Dynamics of Interacting Populations*, vol. 11. World Scientific, 1998.
- [61] C. S. Holling, “The components of predation as revealed by a study of small-mammal predation of the european pine sawfly,” *The Canadian Entomologist*, vol. 91, no. 5, p. 293–320, 1959.
- [62] D. Gonze and W. Abou-Jaoudé, “The Goodwin model: Behind the Hill function,” *PloS one*, vol. 8, no. 8, p. e69573, 2013.
- [63] L. D. EW and E. Vanden-Eijnden, “Nested stochastic simulation algorithm for chemical kinetic systems with disparate rates,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 123, no. 19, p. 194107, 2005.
- [64] M. Vellela and H. Qian, “A quasistationary analysis of a stochastic chemical reaction: Keizer’s paradox,” *Bulletin of Mathematical Biology*, vol. 69, no. 5, pp. 1727–1746, 2007.
- [65] T. Plesa, T. Vejchodský, and R. Erban, “Test models for statistical inference: Two-dimensional reaction systems displaying limit cycle bifurcations and bistability,” in *Stochastic processes, multiscale modeling, and numerical methods for computational cellular biology*, pp. 3–27, Springer, 2017.
- [66] L. Becker, M. Mendler, and B. Drossel, “Relation between the convective field and the stationary probability distribution of chemical reaction networks,” *New Journal of Physics*, vol. 22, no. 3, p. 33012, 2020.
- [67] O. Shoval and U. Alon, “Snapshot: Network motifs,” *Cell*, vol. 143, no. 2, pp. 326–326, 2010.
- [68] A. V. Hill, “The combinations of haemoglobin with oxygen and with carbon monoxide. i,” *Biochemical Journal*, vol. 7, no. 5, pp. 471–480, 1913.
- [69] B. Joshi, “A detailed balanced reaction network is sufficient but not necessary for its Markov chain to be detailed balanced,” *arXiv preprint arXiv:1312.4196*, 2013.
- [70] R. Grima, “An effective rate equation approach to reaction kinetics in small volumes: Theory and application to biochemical reactions in nonequilibrium steady-state conditions,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 133, no. 3, p. 035101, 2010.
- [71] A. J. McKane, J. D. Nagy, T. J. Newman, and M. O. Stefanini, “Amplified biochemical oscillations in cellular systems,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 128, no. 1-2, pp. 165–191, 2007.
- [72] P. Thomas, A. V. Straube, J. Timmer, C. Fleck, and R. Grima, “Signatures of nonlinearity in single cell noise-induced oscillations,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 335, pp. 222–234, 2013.
- [73] A. Duncan, S. Liao, T. Vejchodský, R. Erban, and R. Grima, “Noise-induced multistability in chemical systems: Discrete versus continuum modeling,” *Physical Review E*, vol. 91, no. 4, p. 042111, 2015.

Wissenschaftlicher Werdegang

- seit 2017 Promotion in der AG Drossel, TU Darmstadt
- 2014 - 2017 Master of Science, Physik, TU Darmstadt
Master-Thesis: *Untersuchung von Methoden zur Charakterisierung stochastischer Reaktionsnetzwerke anhand der Wahrscheinlichkeitsmaxima* (AG Drossel)
- 2011 - 2014 Bachelor of Science, Physik, TU Darmstadt
Bachelor-Thesis: *Quantendarwinismus und Dissipation in offenen Qubit-Systemen* (AG Alber)

Publikationen

- Balaneskovic, N., & Mendler, M. (2016). Dissipation, dephasing and quantum Darwinism in qubit systems with random unitary interactions. *The European Physical Journal D*, 70(9), 1-15.
- Falk, J., Mendler, M., & Drossel, B. (2017). A minimal model of burst-noise induced bistability. *PloS one*, 12(4), e0176410.
- Mendler, M., Falk, J., & Drossel, B. (2018). Analysis of stochastic bifurcations with phase portraits. *PloS one*, 13(4), e0196126.
- Becker, L., Mendler, M., & Drossel, B. (2020). Relation between the convective field and the stationary probability distribution of chemical reaction networks. *New Journal of Physics*, 22(3), 033012.
- Mendler, M. & Drossel, B. (2020). Predicting properties of the stationary probability currents for two-species reaction systems without solving the Fokker-Planck equation. *Physical Review E*, 102 (2), 022208.

Danksagung

Zum Schluss möchte ich mich noch bei all den lieben Menschen bedanken, die mich auf dem Weg zu dieser Arbeit unterstützt und begleitet haben.

Mein besonderer Dank geht an meine Doktormutter Barbara Drossel, die in Form zahlreicher Diskussionen und Ideen ganz entscheidend zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Die freie Arbeitsweise, die sie mir ermöglicht hat, die gute Verteilung der Lehraufgaben, der unglaublich verständnisvolle Umgang, zuerst mit meiner Elternzeit und später mit den Krippenschließungen und der „Arbeit“ im Home-Office aufgrund der Corona-Pandemie und nicht zuletzt das tolle Arbeitsklima und die regelmäßigen AG-Workshops waren eine erhebliche Stütze und Motivation für mich.

Auch bei Benno Liebchen möchte ich mich bedanken, dafür dass er spontan zugesagt hat, das Zweitgutachten für meine Dissertation zu übernehmen.

Mein besonderer Dank geht auch an Johannes Falk. Er hat mich während meiner Masterarbeit betreut und mir geholfen, mich in die komplexe Welt der stochastischen Systeme einzudenken. Gerade zu Beginn meiner Promotion haben die enge Zusammenarbeit und die vielen Diskussionen mit ihm sehr stark zu meinem Verständnis dieser Thematik beigetragen. Aber auch gegen Ende seiner Promotion, als wir uns mehr und mehr mit unterschiedlichen Themen beschäftigten, hatte Johannes stets ein offenes Ohr für Fragen und Diskussionen. Auch hat er mich immer wieder auf interessante Publikationen aufmerksam gemacht.

Auch den übrigen (ehemaligen) Mitgliedern von CompuGene möchte ich danken. Es war eine sehr interessante Erfahrung, Teil eines so interdisziplinären Teams zu sein, auch wenn diese Arbeit letztendlich doch eher theoretischer Natur ist. Auch das Symposium, die Vorträge und die diversen Retreats möchte ich nicht missen, obwohl ich oftmals nicht allen Vorträgen folgen konnte.

Im Laufe meiner Promotion durfte ich auch einige Bacheloranden mitbetreuen, welche ebenfalls den ein oder anderen Teil zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben: Jonas Müller, Jan Heinz und Christine Buck. Schon alleine durch das Beantworten eurer Fragen sind mir oft Dinge klar geworden, die ich selbst noch nicht verstanden hatte. Ohne Christine hätten wir außerdem wahrscheinlich nie die Motivation aufgebracht, uns im Detail mit zufälligen dynamischen Systemen und p- und d-Bifurkationen auseinanderzusetzen.

Zudem durfte ich auch eine Masterandin, Lara, betreuen. Sie hat die hier entwickelten Methoden immer wieder in Frage gestellt und ausgiebig getestet. Auch das Beispiel der positiven Feedbackschleife, das in dieser Arbeit zur Untersuchung der j -Ströme genutzt wurde, hat Lara als Erste anhand des Konvektionsfelds untersucht. Zu sehen, dass meine selbst entwickelte Methode auch von anderen Forschenden genutzt wird, hat mich sehr motiviert. Ohne diese Motivation wäre das Endlosprojekt „j-Paper“ wohl niemals fertig geworden. Auch hat Lara Teile meiner Arbeit mit ihren übermenschlichen Rechtschreibungs-Skills Probe gelesen.

Auch dem Rest der AG möchte ich für die tolle Arbeitsatmosphäre und die schönen gemeinsamen Aktivitäten danken, wie zum Beispiel Konferenzen, AG-Workshops, Spieleabende, Wandern, Bouldern, Stammtische und unsere Rollenspielgruppe. Die gemeinsame Zeit mit euch war einfach genial und ging viel zu schnell vorbei. Umso mehr bin ich enttäuscht, dass all das nun gegen Ende meiner Zeit in der Gruppe, genau wie eine ordentliche Doktorfeier, nicht mehr stattfinden kann. Ich wünsche Euch allen das Beste und hoffe, dass ihr diese Zeit auch weiterhin gut übersteht.

Zu guter Letzt möchte ich natürlich auch meiner Familie danken: Meinen Eltern und Geschwistern, die mich immer unterstützt haben. Meinem Opa Richi, der stets mit großem Stolz meine akademischen Leistungen verfolgt. Meiner Tochter Merle, die sich jetzt endlich auch mal für zehn Minuten alleine beschäftigen kann. Und natürlich meiner Frau Isabella, ohne die ich heute nicht hier sitzen und diese Worte schreiben würde: Ohne dich hätte ich wahrscheinlich nie Physik studiert. Schon gar nicht in Darmstadt. Ich hätte meine Masterarbeit nicht der in AG Drossel geschrieben. Wenn doch, hätte ich vermutlich eher Nahrungsnetze erforscht als stochastische Systeme. Du hast mir immer den Rücken freigehalten und mich unterstützt. In den letzten Monaten hast du besonders viel auf Merle aufgepasst, damit ich weiterschreiben konnte. Du hast die ganze Arbeit nochmal Probe gelesen und etliche Rechtschreibfehler entdeckt. Und ohne dich hätte ich mich wohl niemals dazu motivieren können, diese Danksagung zu schreiben.